ELEKTRONENSPEKTROSKOPISCHE UNTERSUCHUNGEN AN EINKRISTALLINEM SELEN UND TELLUR

Peter Bammes

1972

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41546014_0092

Elektronenspektroskopische Untersuchungen an einkristallinem Selen und Tellur

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Fakultät für Physik

der

Ludwig - Maximilians - Universität

zu München

vorgelegt

von

Peter Bammes

aus

Dresden

München

April 1972

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1. Berichterstatter: Prof. Dr. W. Rollwagen
2. Berichterstatter: Prof.Dr.Sizmann
Tag der mündlichen Prüfung: 16.6.1972

Inhalt Seite

1. Einführung 5

2. Die Schichten und ihre Herstellung
2.1. Struktur 10
2.2. Herstellung der Schichten 11
2.2.1. Amorphes Selen 11
2.2.2. Einkristallines Selen 11
2.2.3. Einkristallines Tellur 13
2.2.4. Schichtdickenbestimmung von Selenschichten 13

3. Apparatur 16
3.1. Energieverlustmessung von gestreuten Elektronen 17
3.2. Zum Objekthalter 19
3.3. Zum Kondensor 19
3.4. Magnetfeldregelung 20
3.5. Meßgenauigkeit
3.5.1. Verlustenergie 22
3.5.2. Winkel 23
3.5.3. Intensität 25

4. Zur Auswertung 26
4.1. Festlegung des Impulsübertrages 26
4.2. Meßdaten und Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$
4.2.1. Verlustmöglichkeiten 29
4.2.2. Verlustwahrscheinlichkeiten 29
4.2.3. Verlustintensitäten 30
4.2.3.1. Mehrfachverluste 30
4.2.3.2. Intensität der verlustfreien Elektronen . 31
4.2.3.3. Faltung mit Schicht- und Apparatureigenschaften 32
4.3. Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ und optische Daten . 37
4.3.1. Kramers-Kronig-Analyse 37
4.3.2. Realteil $\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}$ und optische Daten 39

5. Ergebnisse bei Selen 43
5.1. Im ε^{-1} für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ und $\underline{q} \perp \underline{c}$ 43
5.2. Absolutmessungen 46
5.3. Optische Konstanten 49
5.4. Erste Interpretation 56
5.5. Vergleich mit anderen Ergebnissen 59
5.6. Weitere Interpretation 66
5.7. Nichtsenkrechte Interbandübergänge 68
5.8. Spektren bis 70 eV 73
5.9. Anisotrope Plasmonen 74

6. Ergebnisse bei Tellur 77
6.1. Im ε^{-1} für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ und $\underline{q} \perp \underline{c}$ 77
6.2. Absolutmessungen 80
6.3. Optische Konstanten 80
6.4. Vergleich mit anderen Ergebnissen 84
6.5. Interpretation 87

7. Zusammenfassung 91

8. Anhang: Rechenprogramm zur Berechnung der optischen Konstanten 93

9. Literaturverzeichnis 99

1. Einführung

Die Aufklärung der elektronischen Struktur von kristallinem Selen und Tellur war in den letzten Jahren das Ziel zahlreicher experimenteller und theoretischer Arbeiten. Ein Hilfsmittel dazu ist die experimentelle Bestimmung optischer Konstanten an einkristallinem Selen und Tellur. Dies ist mit optischen oder elektronenspektroskopischen [1] Mitteln möglich.

Bei Beginn unserer Arbeit lagen schon mehrere optische Untersuchungen zu diesem Thema vor. Meistens handelte es sich um Reflexionsmessungen im optisch leichter zugänglichen Gebiet kleinerer Energien bis maximal 14 eV (Literaturangaben in 5.5. und 6.4.).

Da für eine möglichst vollständige Interpretation auch die Ergebnisse von CEV-Messungen*) vorliegen sollten, haben wir sie zum Ziel dieser Arbeit gewählt. Einige Vorteile der CEV-Methode (Überschaubarkeit eines großen Energiebereiches (2 - 70 eV) in einer Messung, geringer Einfluß von Oberflächenbeschaffenheiten, leichte Nachweisbarkeit von optischer Anisotropie, Variation des Impulsübertrages) versprachen eine weitere Aufklärung der elektronischen Eigenschaften von Selen und Tellur. Zudem ergab sich die günstige Gelegenheit, mit einer Arbeitsgruppe zusammenzuarbeiten, die am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) während unserer Arbeit optische Reflexionsmessungen an einkristallinem Selen und Tellur durchführte. So war es

---

*) Charakteristische Energieverluste schneller Elektronen (10 - 60 keV).

möglich, einen gemeinsamen Vergleich der optischen und der CEV-Messungen zu machen [2].

Das gemeinsame Ziel beider Messungen war die Bestimmung der komplexen Dielektrizitätskonstante $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$. Im Falle optisch anisotroper Medien muß man ε zu einem komplexen Tensor $\underline{\underline{\varepsilon}}$ *) erweitern. Er beschreibt den Zusammenhang zwischen der elektrischen Feldstärke $\underline{E}$ und der Verschiebung $\underline{D}$ in einem optisch nicht aktiven, anisotropen Kristall:

$$\underline{D} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \cdot \underline{E}$$

Im allgemeinen gilt $\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ki}$, so daß wir maximal zwölf Komponenten $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{ik}$ und $\mathrm{Im}\,\varepsilon_{ik}$ zu bestimmen haben. Dadurch, daß Selen und Tellur optisch einachsige Symmetrie aufweisen, vereinfacht sich der Tensor erheblich:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp c} & 0 & \\ & \varepsilon_{\perp c} & \\ 0 & & \varepsilon_{\parallel c} \end{pmatrix}$$

Nur noch vier Komponenten $\varepsilon_{1\parallel c}, \varepsilon_{1\perp c}, \varepsilon_{2\parallel c}$ und $\varepsilon_{2\perp c}$ sind zu bestimmen. Hierbei wurde eine Koordinatenachse parallel zur kristallographischen dreizähligen c-Achse gelegt.

Diese vier Komponenten bestimmen hauptsächlich die Ergebnisse unserer CEV-Messung. Dazu möchten wir zuerst eine sehr vereinfachte Darstellung der Messmethode geben.

---

*) Tensoren werden durch $\underline{\underline{\ }}$, Vektoren durch $\underline{\ }$ gekennzeichnet.

Elektronen mit der Energie von 30 keV durchqueren eine dünne Schicht (Dicke < 1000 Å) des zu untersuchenden Materials. Für eine jeweils feste Streurichtung ϑ wird die Zahl der Elektronen, die einen bestimmten

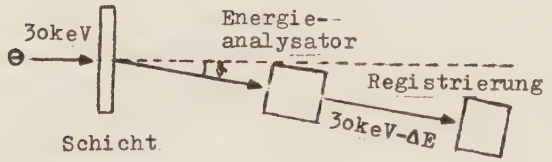


Abb. 1

Energieverlust ΔE erlitten haben, gezählt (Abb. 1). Die Verlustenergie wird relativ zu der Energie der

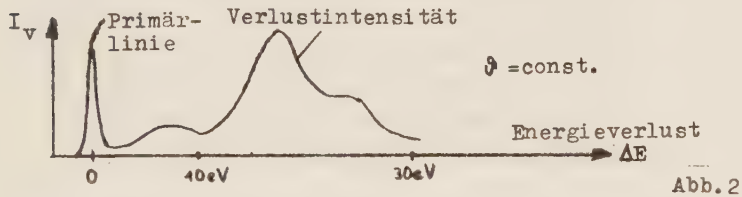


Abb. 2

verlustlosen Elektronen (Primärlinie) bestimmt.

Die relativ kleinen Energieverluste ermöglichen es, den Quasiimpuls*) $\hbar q$, der an die Festkörperelektronen abgegeben wird, aus Streurichtung und Verlustenergie zu berechnen (4.1.). Mit dielektrischer Theorie erhält man [3] für die Verlustintensität I_v:

$$I_v \propto \mathrm{Im}\ (\underline{q} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \underline{q})^{-1}$$

Wählt man nun die Streurichtung der gemessenen Elektronen so, daß $\underline{q} \parallel \underline{c}$ oder $\perp \underline{c}$ liegt, so vereinfacht sich

---

*) Wir unterschlagen ab hier die Einschränkung "Quasi-", da sie auf unsere Überlegungen keinen Einfluß hat.

dieses unübersichtliche Produkt zu:

$$I_V \propto q^{-2}\ \mathrm{Im}\,\varepsilon_{\parallel c}^{-1} \quad \text{für } \underline{q} \parallel \underline{c}$$

$$\propto q^{-2}\ \mathrm{Im}\,\varepsilon_{\perp c}^{-1} \quad \text{für } \underline{q} \perp \underline{c}$$

Durch die Wahl der $\underline{q}$-Richtung und die Messung von I_V kann also $\mathrm{Im}\,\varepsilon_{\parallel c}^{-1}$ und $\mathrm{Im}\,\varepsilon_{\perp c}^{-1}$ und damit (Kramers-Kronig-Analyse) $\varepsilon_{\parallel c}$ und $\varepsilon_{\perp c}$ bestimmt werden.

Hier muß erwähnt werden, daß ε eine Funktion von ΔE ($\hbar\omega$) und $\underline{q}$ ist. Bei optischen Experimenten ist im allgemeinen $|\underline{q}| \approx o$, bei CEV-Experimenten ist dagegen $|\underline{q}| > o$. Ein optisch und elektronenspektroskopisch ermitteltes ε können sich deshalb unterscheiden. Die Variation des Parameters $\underline{q}$ liefert zusätzliche Information über die elektronische Struktur des Festkörpers. Diesen Vorteil der CEV-Messungen sollte man nicht übersehen.

Den Zugang zur elektronischen Struktur gibt der Imaginärteil von ε [4]:

$$\varepsilon_2(\hbar\omega, \underline{q}) \propto \frac{1}{\omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} d^3\underline{k} \left| \underline{e} \cdot \underline{M}_{v,c}(\underline{k}, \underline{q}) \right|^2 \cdot \delta\left(E_c(\underline{k}+\underline{q}) - E_v(\underline{k}) - \hbar\omega\right)$$

v	= Valenzband
c	= Leitungsband
$\underline{e} \cdot \underline{M}_{v,c}$	= Matrixelement
$\underline{k}$	= Wellenvektor
$\underline{E}$	= Energieeigenwert
BZ	= Brillouinzone

Man kann das experimentell ermittelte ε_2 mit einem theoretischen ε_2 vergleichen, wenn das Matrixelement und die Bandstruktur ($E(\underline{k})$) bekannt sind.

Setzt man das Matrixelement als $\underline{k}$-unabhängig an und vernachlässigt $\underline{q}$, so kann man schon allein an Hand der Bandstruktur Vergleiche mit den experimentellen Ergebnissen ziehen:

$$\varepsilon_2(\hbar\omega) \propto \frac{1}{\omega^2} \sum_{v,c} \left| \underline{e} \cdot \underline{M}_{v,c} \right|^2 \cdot J_{v,c}$$

Die kombinierte Zustandsdichte $J_{v,c}$ läßt sich nämlich allein aus der Bandstruktur berechnen.

2. Die Schichten und ihre Herstellung

2.1. Struktur

Selen und Tellur kristallisieren beide in einer anisotropen trigonalen Struktur (Raumgruppe $P3_121$). Die Atome bilden Ketten parallel zur dreizähligen C-Achse, die sie spiralig umwinden. Längs der $(10\bar{1}0)$-Ebenen lassen sich die Kristalle spalten (Abb. 3).
Trigonales Selen und Tellur unterscheiden sich kristallographisch nur in den Gitterkonstanten, hauptsächlich in der c-Richtung:

	Selen	Tellur
c	4,95 Å	5,91 Å
a	4,36 Å	4,45 Å

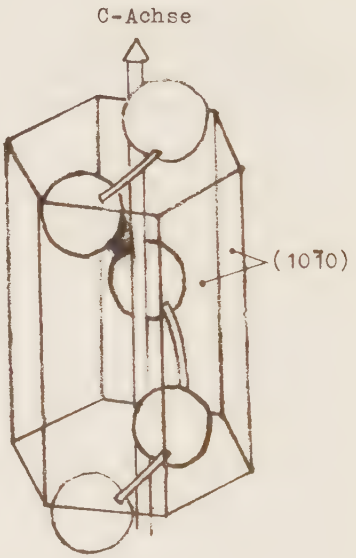


Abb. 3: Einheitszelle von Selen und Tellur mit 3 Atomen.

Amorphes Selen besteht aus ungeordneten Atomketten und Atomringen, also aus Bruchstücken trigonalen und monoklinen Selens.

2.2. Herstellung der Schichten

Für unsere Untersuchungen benötigten wir Schichten von relativ konstanter Dicke und ebener Oberfläche. Ätzmethoden und ähnliche Verfahren [5] erfüllen diese Forderungen kaum über Bereiche von einigen μ. Deshalb wurden von uns alle Schichten durch Aufdampfen hergestellt.

Bei der Gewinnung von einkristallinen Schichten wurde der Umstand ausgenützt, daß Selen auf Tellur [6] und Tellur auf Selen [7] epitaktisch aufwächst.

Das verwendete Selen und Tellur hatte eine Reinheit von 99,99 %.

2.2.1. Amorphes Selen

Bei Zimmertemperatur aufgedampftes Selen ist unabhängig vom Substrat immer amorph. Unsere Schichten entstanden bei Zimmertemperatur und einem Druck unter 1.10^{-5} Torr auf glatten Spaltflächen von Kochsalzeinkristallen. Nach Ablösen in Wasser wurden sie freitragend auf 50 μ-Blenden präpariert.

2.2.2. Einkristallines Selen

Bei der Herstellung von einkristallinen Selenschichten wurde die von Griffiths [6] angegebene Methode verwendet.

Bei einem Druck unter $1 \cdot 10^{-5}$ Torr wurde das Selen auf $(10\bar{1}0)$-Spaltflächen eines Tellurkristalls aufgedampft. Der Tellurkristall war dabei auf 115° C erwärmt. Der die Selenschicht tragende Tellurkristall wurde dann in 20% HNO_3 [6] aufgelöst. Dazu schwamm der kleine Tellurkristall, durch die Oberflächenspannung gehalten, auf der Oberfläche der Säure und wurde langsam von unten aufgelöst (Abb. 4). Die nach dem Auflösen zurückgebliebene Selenschicht wurde zur Reinigung auf eine Wasseroberfläche umgebettet und dann freitragend auf eine 50 u-Blende präpariert.

Trotz schonender Behandlung wird die Schicht oft zerstört.

Abb.4

Die Beugungsaufnahme zeigt, daß die Selenschicht auf der $(10\bar{1}0)$-Fläche des Tellurkristalls mit gleicher Orientierung weitergewachsen ist.(Abb.5 und 6).

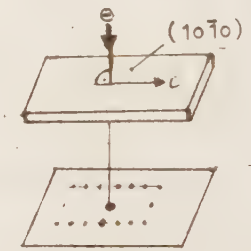


Abb.5: Orientierung des Kristalls

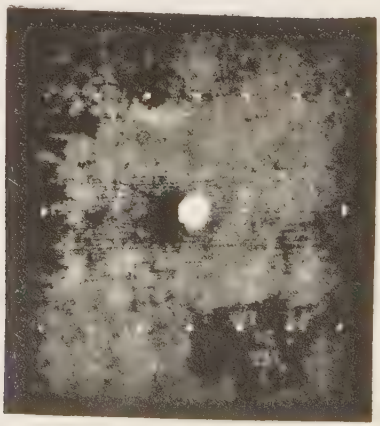
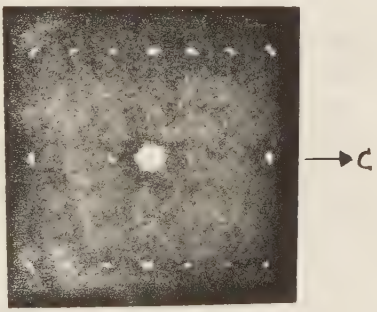


Abb.6

2.2.3. Einkristallines Tellur [7]

Schon auf Lochblenden präparierte Selenschichten wurden wieder mit Tellur bedampft. Dabei waren die Blenden auf 117° C erwärmt. Diese Temperatur wurde für eine Stunde auf 160° C erhöht, um die Selenschicht unter der aufgedampften Tellurschicht abzudampfen.



Die Beugungsaufnahme zeigt, daß die Tellurschicht mit einer $(10\bar{1}0)$-Orientierung ihrer Oberfläche weitergewachsen ist (Abb. 7). Mikroaufnahmen im Elektronenmikroskop zeigten, wie auch bei Selen, keinerlei Strukturen, wohl aber Risse, die durch die Erwärmung bei der Beugungsaufnahme auftreten. Bei CEV-Untersuchungen wurden aber weit geringere Elektronenstrahlintensitäten benützt.

2.2.4. Schichtdickenbestimmung von Selenschichten

Die Schichtdicke wurde mit der von Tolansky [8] angegebenen Methode gemessen. Da optisch glatte Oberflächen nur aus Glas zur Verfügung standen, wurden diese zuerst mit dem jeweiligen Substrat bedampft. Zur Verspiegelung der daraufgedampften Selenschichten wurde Tellur verwendet, da Al und Ag chemisch mit Se reagieren und die Verbindung an der Oberfläche rauh ist.

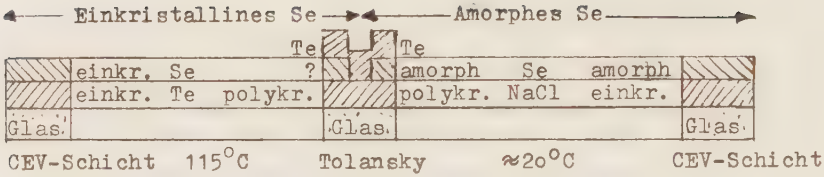


Abb.8

Auch die Reflektivität der verspiegelnden Te-Schicht war nicht sehr hoch und es konnte so nicht die Genauigkeit von Messungen mit Al-verspiegelten Schichten erreicht werden. Als weiterer Unsicherheitsfaktor kommt hinzu, daß die Substrate bei Tolansky- und bei CEV-Schichten nicht ganz gleich waren (siehe Abb. 8).

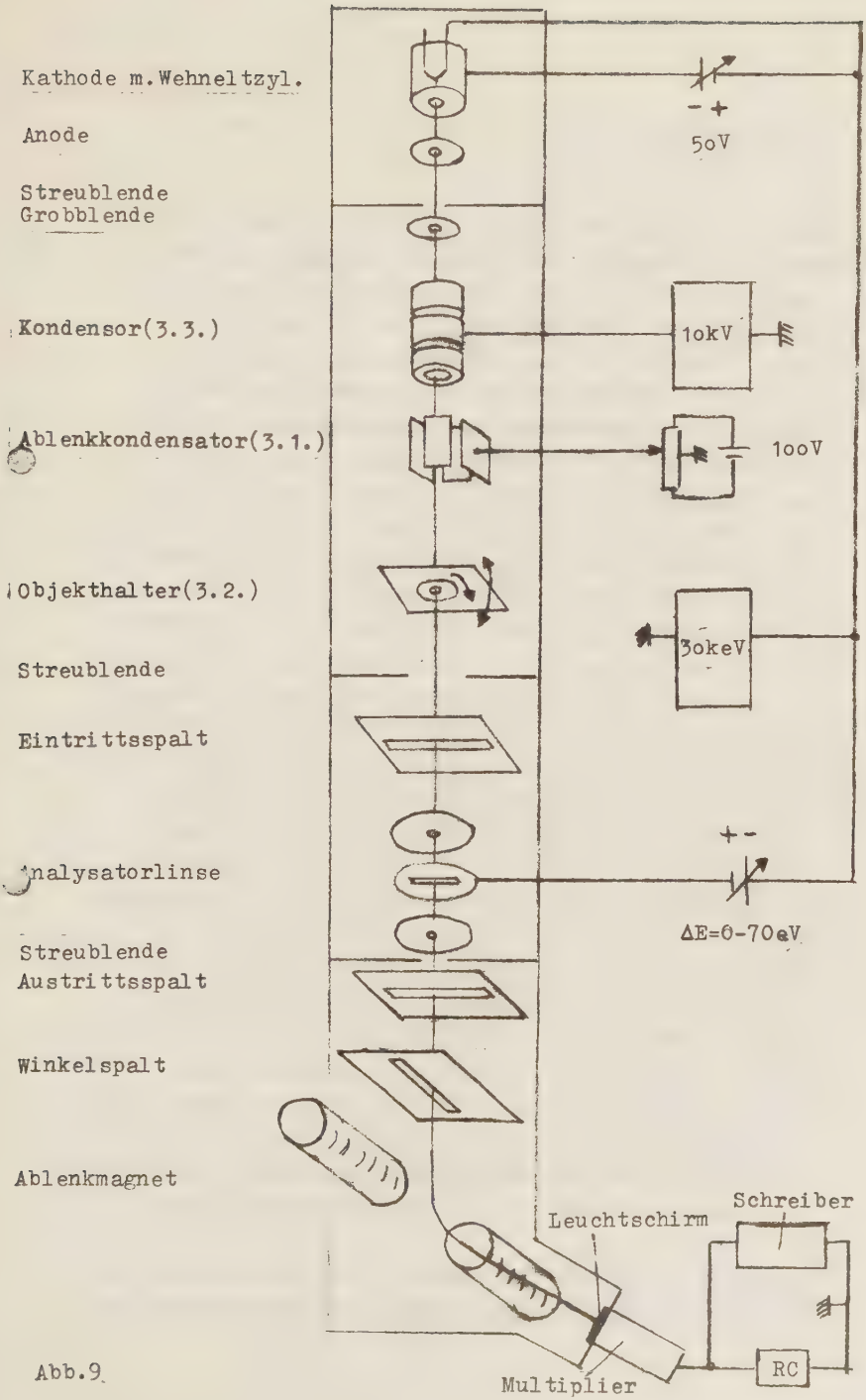

Kathode m.Wehneltzyl.
Anode
Streublende
Grobblende
Kondensor(3.3.)
Ablenkkondensator(3.1.)
Objekthalter(3.2.)
Streublende
Eintrittsspalt
Analysatorlinse
Streublende
Austrittsspalt
Winkelspalt
Ablenkmagnet
- +
50V
10kV
100V
30keV
+ -
ΔE=0-70eV
Leuchtschirm
Schreiber
RC
Multiplier

Abb.9

3. Apparatur

Bis auf einige Änderungen, die sich im Rahmen unserer Arbeit als vorteilhaft erwiesen, ist die Apparatur schon an anderer Stelle [9] beschrieben. Deshalb soll der Aufbau nur kurz skizziert (Abb. 9) werden:

Der von der Elektronenkanone erzeugte 30 KeV-Elektronenstrahl wird zuerst grob ausgeblendet. Eine Einzellinse, die auf ca. 10 KV angespannt ist, bildet zur Intensitätssteigerung die Elektronenquelle auf einen Ort ab, der weit hinter dem Objekthalter liegt. Zwei Kondensatoren, die senkrecht zueinander stehen, erlauben den Strahl innerhalb eines spitzen Kegels in jede Richtung abzulenken. Der Strahl wird nun durch die 50 /um-Blende, die im Objekthalter eingebaut ist und auf der sich die zu untersuchende Schicht befindet, verengt. Elektronen, die am Objekthalter gestreut werden, fängt eine Streublende vor dem Analysator auf. Der Möllenstedtanalysator [10, 11] für die Energieverlustmessung besteht aus Eintrittsspalt, Zylinderlinse und Austrittsspalt. Er wird im sog. Kaustikstrahlengang betrieben. Eine bestimmte Potentialänderung an der Mittelelektrode entspricht direkt dem Energieverlust der durchgelassenen Elektronen. Die Ebene der Energiedispersion liegt senkrecht zu den Spalten. Kombiniert mit diesen Spalten sorgt der Winkelspalt für eine größere Winkelauflösung des Analysators. Um das Streulicht aus der Kathode zu verringern, wird der Elektronenstrahl zum Leuchtschirm vor dem Multiplier abgelenkt. Ein Kompensationsschreiber registriert die Signalspannung, die an einem RC-Glied abfällt.

Kleinste Änderungen des Magnetfeldes beeinflußten den Elektronenstrahl störend. Zwei modifizierte Helmholtz-

spulen kompensieren die Störfelder in allen Richtungen senkrecht zum Elektronenstrahl.

3.1. Energieverlustmessung von gestreuten Elektronen

Ursprünglich wurden die Elektronen nach Passieren des Objektes von einem Magnetfeld abgelenkt, um die Energieverluste gestreuter Elektronen zu messen [9]. Es konnten nur Elektronen untersucht werden, die in die

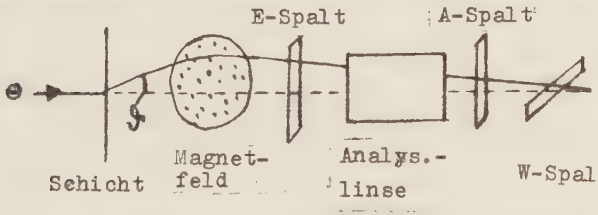


Abb. 1o

Ebene gestreut wurden, die aus Eintritts- und Austrittsspalt gebildet wird (Abb. 10). Diese Beschränkung stört nicht, wenn die Streuintensität rotationssymmetrisch zur optischen Achse ist. Bei der Untersuchung der anisotropen Selen- und Tellurschichten erwies es sich aber als günstiger, in jeder Streurichtung analysieren zu können. Dazu wurde die Ablenkung vor das Objekt gelegt. Man kann damit den Strahl praktrisch paralleler ($\Delta\vartheta \approx 1 \cdot 10^{-4}$rad) Elektronen mit verschiedenen Einfalls- und Azimutwinkeln durch das Objekt treten lassen (Abb. 11).

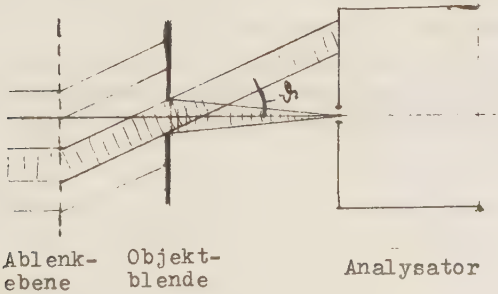
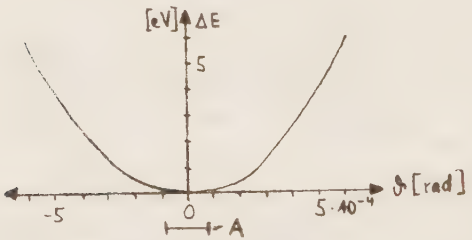


Abb. 11

Der Analysator untersucht nur Elektronen, die aus einer bestimmten Richtung einfallen. Die Genauigkeit dieser Richtung ist einerseits durch die Öffnungen des Eintritts- und Winkelspaltes, andererseits durch die Öffnung der Objektblende festgelegt. Außerdem wird der Durchmesser der Objektblende durch die sehr geringe Winkelakzeptanz unseres Möllenstedtanalysators in der Energiedispersionsebene begrenzt. Schon bei Einfallswinkeln von $1 \cdot 10^{-4}$ rad tritt eine merkliche Verschiebung des Energiespektrums auf (Abb. 12).



A = Apertur bei 50 µ-Blende

Abb. 12: Energieverschiebung ΔE bei Änderung des Einfallswinkels ϑ.

Bei zu großer Apertur bewirkt diese Verschiebung eine Verschlechterung der Energieauflösung. Die benützten Objektblenden besaßen Öffnungen mit 50 µm Durchmesser und begrenzten damit die Apertur auf $1{,}6 \cdot 10^{-4}$ rad.

Wird die Intensität der verlustlosen Elektronen als Funktion des Ablenkwinkels gemessen, so ergeben sich Winkelverteilungsfunktionen, deren Breite in der Tat von der oben angegebenen Apertur begrenzt sind.

3.2. Zum Objekthalter

Auf dem Objekthalter konnten mehrere Blenden befestigt werden, die die zu untersuchenden Schichten trugen. Eine Blende konnte im Vakuum um eine Achse senkrecht zur Schicht gedreht werden. Der Objekthalter ließ sich um eine Achse parallel zur Schicht drehen.

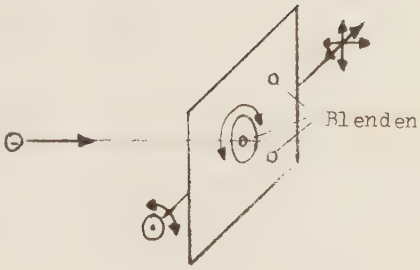


Abb. 13

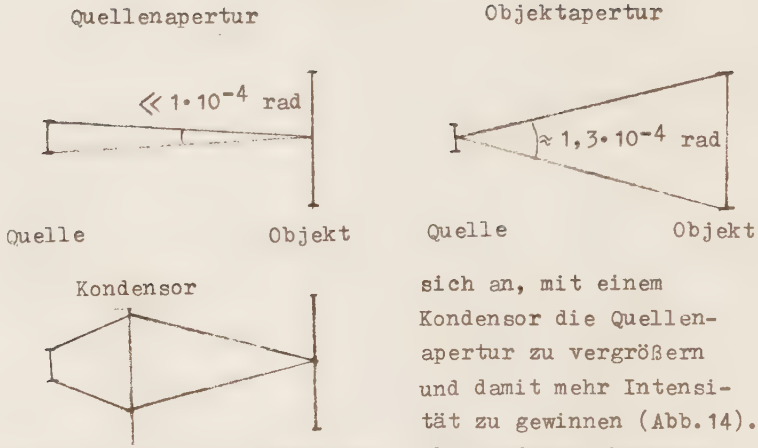
Diese Drehachse konnte im Vakuum senkrecht zum Elektronenstrahl eingestellt werden (Abb. 13).

3.3. Zum Kondensor

Die Intensität der Objektbeleuchtung mit dem Elektronenstrahl reichte nicht dazu aus, kleinere Strukturen in den Energieverlustspektren bei großen Streuwinkeln aufzulösen. Die Verlustintensität zeigte wegen der geringen Anzahl von gemessenen Elektronen schon statistische Schwankungen.

Dazu war bei der Beleuchtung des Objektes die Quellenapertur nicht an die Objektapertur angepaßt. Hier bot

Abb. 14



sich an, mit einem Kondensor die Quellenapertur zu vergrößern und damit mehr Intensität zu gewinnen (Abb.14). Als Kondensor kam nur eine elektrostatische Einzellinse in Betracht, da technisch leichter realisierbare, magnetische Linsen mit ihrem großen Streufeld die Magnetfeldregelung beeinflußt hätten. Die Einzellinse wird von drei gleichen Hohlzylindern gebildet. Für die relativ großen Brennweiten, die hier für die Aperturanpassung erforderlich waren, genügte eine Spannung von 10 KV an der Mittelelektrode. Die Intensität der Verlustspektren vervierfachte sich.

3.4. Die Magnetfeldregelung

Schon Schwankungen des Magnetfeldes von $5 \cdot 10^{-4}$ Oersted ergaben störende Einflüße auf die Verlustintensität. Vorhandene Magnetfeldregelungen erwiesen sich für unsere Aufgabe als unzureichend. Mit Höhberger [12] wurde deshalb eine neue Regeleinrichtung aufgebaut.

Eine Förstersonde mißt die wegzuregelnde Störfeldstärke.(Abb. 15). Ihr Signal wird um so viel verstärkt auf eine Helmholtzspule gegeben, daß das Stör-

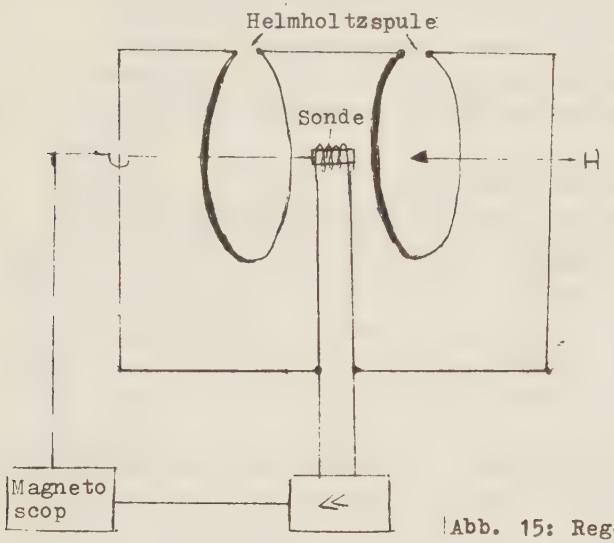


Abb. 15: Regelprinzip

feld gerade kompensiert ist. Damit die Sonde trotzdem noch das Störfeld sieht, ist sie von einer kleinen Hilfsspule umgeben, die nur am Sondenort wiederum das Regelfeld kompensiert. Da dieser Regler ohne Rückkopplung über das Magnetfeld arbeitet, wird eine hohe Konstanz und genaue Einstellung der Verstärkung verlangt. Die relativ kleinen Verstärkungen, die hier nötig waren, erlauben solche Anforderungen. Das geregelte Magnetfeld schwankte bei den üblichen Störfeldänderungen von 20 mOe um weniger als 0,05 mOe, langfristig änderte sich das Feld um 0,2 mOe.

Nur am Sondenort läßt sich diese Regelgenauigkeit erreichen. Denn für die Erhaltung der Regelgenauigkeit

längs des ganzen Elektronenstrahls ist die genaue Übereinstimmung der Feldform von Störfeld und Regelfeld erforderlich. Da der schwankende Anteil des Magnetfeldes relativ homogen war - im Gegensatz zum statischen Feld - wurden als Regelspulen Helmholtzspulen gewählt, die über die Länge des Elektronenstrahls die Homogenität der Störfelder erreichten.

Nicht zu schnelle Änderungen (> 50 ms) des Feldes von 20 mOe waren so nicht mehr in der Verlustintensität zu registrieren.*)

3.5. Meßgenauigkeit

3.5.1. Verlustenergie

Die Genauigkeit der Energieeichung war von der Spannungsmessung an der Mittelelektrode der Analysatorlinse und vom Gleichlauf zweier Motoren abhängig. Die Spannung wurde von Zenerdioden mit sehr geringem Temperaturgang stabilisiert. Im ganzen Bereich von 30 eV lag der Fehler der Eichung bei $\pm$ 0,1 eV. Die Ablesegenauigkeit der Spektren ist entsprechend gewählt.

---

*) Es sei mir die persönliche Bemerkung erlaubt, daß die Fertigstellung der Münchner U-Bahn auch unserer Arbeitsgruppe große Vorteile einbrachte. Die magnetischen Störungen der U-Bahn sind nämlich wesentlich geringer als die der Straßenbahn (kleinerer Dipol). Leider wurde für meine Arbeit die U-Bahn zu spät fertiggestellt.

Die Energieauflösung ist durch die Energiebreite des Strahls (ca. 0,5 eV) begrenzt. Mit unserer Apparatur wurden minimale Energiehalbwertsbreiten von 0,6 eV erreicht. Aus Intensitätsgründen wurden jedoch die Spalte bis zur Halbwertsbreite von 1,0 eV geöffnet.

3.5.2. Winkel

Die Orientierung der Schicht relativ zum Elektronenstrahl ließ sich mit einem Fehler von maximal 5° festlegen. Durch die Identifizierung der jeweils auftretenden Beugungsreflexe konnte die Justierung kontrolliert werden.

Die Genauigkeit der Richtung der analysierten Streuelektronen relativ zum Einfallsstrahl hing von mehreren Faktoren ab. Der Ablenkkondensator lenkte die Elektronen

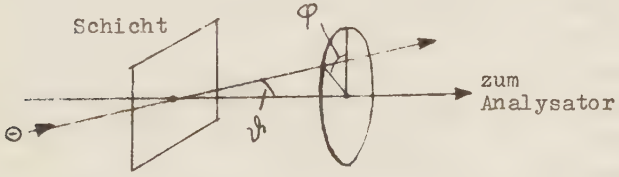


Abb. 16

unter dem Deklinationswinkel ϑ und dem Azimutwinkel φ auf die Schicht ab (Abb. 16). Diese Ablenkwinkel wurden für ϑ auf ± 2,5 %, für φ auf ± 3° genau geeicht. Beide Größen waren dazu mit einer Halbwertsbreite behaftet, die durch die endlichen Aperturen im Strahl entstanden. Zur Ermittlung der Halbwertsbreite von ϑ wurde die Intensität der verlustlosen Elektronen nach Durchquerung der Schicht in Abhängigkeit von ϑ und φ gemessen (Abb. 17).

Es ergaben sich Winkelverteilungsfunktionen mit Halbwertsbreiten $\Delta\vartheta$ von 2 - $3 \cdot 10^{-4}$ rad. Linien gleicher

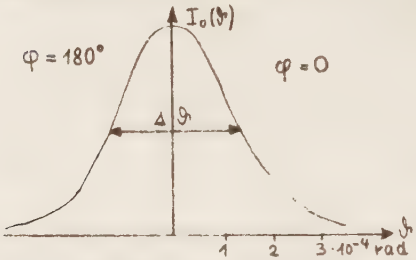


Abb. 17: Typische Winkelvert.fktn.

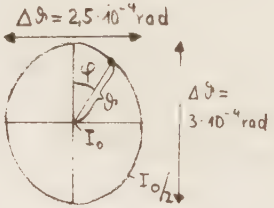


Abb. 18

Intensität in der Polardarstellung von ϑ und φ konnten durch schwach exzentrische Ellipsen angenähert werden (Abb. 18). Ihre Größe ist durch die Faltung der Winkelakzeptanz des Analysators mit der Divergenz der verlustfreien Elektronen hinter der Schicht bestimmt.

Die endliche Winkelhalbwertsbreite von ϑ bewirkte eine Unschärfe $\Delta\varphi$ von φ. Die Halbwertsbreite $\Delta\varphi$ hängt stark vom Streuwinkel ϑ ab. Für den meist verwendeten Fall $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad war $\Delta\varphi = \pm 8{,}5°$ bei $\Delta\vartheta = 3 \cdot 10^{-4}$ rad.

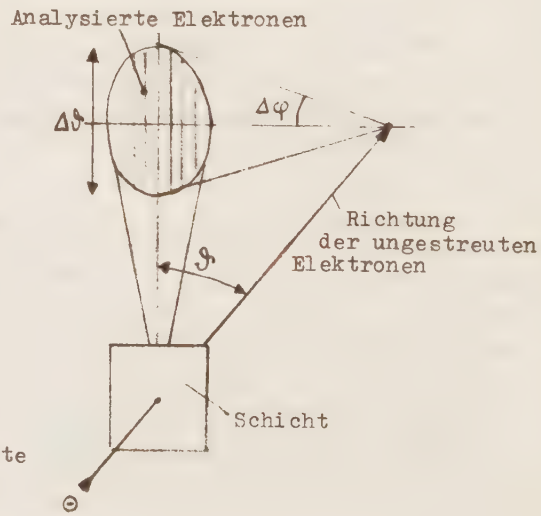


Abb. 19:
Winkelhalbwertsbreite $\Delta\vartheta$ und Winkelhalbwertsbreite $\Delta\varphi$.

3.5.3. Intensität

Die Genauigkeit der Intensitätsmessung war bei den einzelnen Messungen verschieden und wird bei der Auswertung der Messungen besprochen werden.

4. Zur Auswertung

Es wurden Energieverlustspektren von Elektronen gemessen, die in bestimmte Richtungen gestreut wurden. Aus den Spektren wird zuerst die Verlustfunktion

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{q})$$

berechnet, wobei auch noch die Größe und Richtung des an die Schicht abgegebenen Impulses $\underline{q}$ zu ermitteln ist. Die Kenntnis von $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ erlaubt dann die Berechnung optischer Daten.

4.1. Festlegung des Impulsübertrages

Die Richtung der gestreuten Elektronen ist durch den Deklinationswinkel ϑ und den Azimutwinkel φ festgelegt (Abb. 20). Nach Energie- und Winkelmessung kann

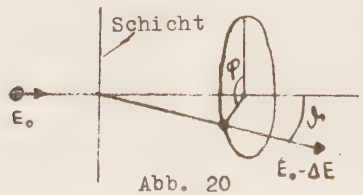


Abb. 20

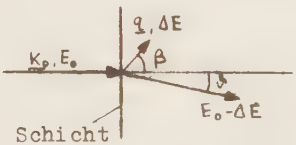


Abb. 21

die Richtung und die Lage des abgegebenen Impulses $\underline{q}$ berechnet werden: $\underline{q}$ liegt in der Streuebene ($\rightarrow \varphi$), für seinen Deklinationswinkel und seinen Betrag gilt bei unserem Experiment [13] (Abb. 21):

$$\tan\beta = \vartheta/\vartheta_E$$

$$q^2 = k_0^2\left(\vartheta^2 + \vartheta_E^2\right)$$

$$\vartheta_E = \Delta E/2E_0$$

ΔE: Energieverlust
E_0: Energie des Elektrons

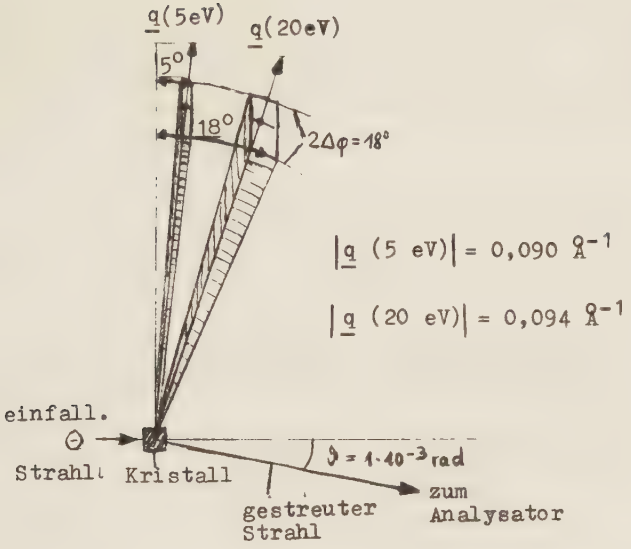


Abb. 22: Halbwertsbereich von q für Energieverlust von 5 eV und von 20 eV.

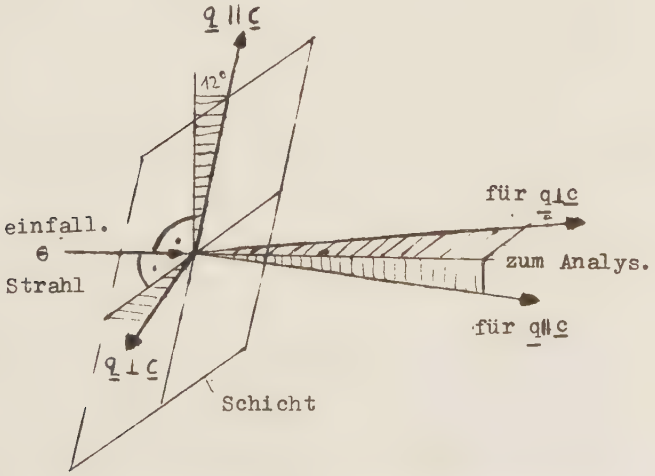


Abb. 23: Lage des q-Vektors relativ zur Schichtebene. (In Wirklichkeit liegt die Richtung zum Analysator fest und die Einfallsrichtung wird um $1 \cdot 10^{-3}$ rad geändert.)

Der abgegebene Impuls $\hbar\underline{q}$ soll in unserem Fall (siehe Einführung) senkrecht oder parallel zur c-Achse der Schichten liegen. Durch die Wahl von ϑ, φ und eine bestimmte Neigung der Schicht läßt sich das immer erreichen.

Es müssen aber noch weitere Gesichtspunkte berücksichtigt werden.

1. Betrag und Richtung von $\underline{q}$ ändert sich bei einem festen Streuwinkel ϑ auch mit dem Energieverlust ΔE. Innerhalb eines Verlustspektrums sollte $\underline{q}$ sich aber möglichst wenig ändern. Das wird durch die Wahl eines großen Streuwinkels erreicht.

2. Die Unschärfe der Streuwinkel ϑ und φ bewirkt eine Unschärfe der Richtung von $\underline{q}$ in β und φ. Die Halbwertsbreite von φ ist in 3.5. besprochen. Die Unschärfe von β hängt von ϑ und vom Energieverlust ΔE ab. Sie bleibt nur bei großen Streuwinkeln ϑ in vernünftigen Grenzen.

Für einen Streuwinkel von $1 \cdot 10^{-3}$ rad, wie er für die Messungen meistens eingestellt war, sind die geschilderten Verhältnisse in Abb. 22 skizziert. Die Winkelhalbwertsbreite ist $3 \cdot 10^{-4}$ rad.

Die Schicht wurde nun um 12° so gegen den Elektronenstrahl geneigt, daß die in der Schichtebene liegende c-Achse in die Mitte des Bereiches zu liegen kommt, den der $\underline{q}$-Vektor innerhalb eines Verlustspektrums durchwandert (Abb. 23). So liegt für den Fall $\underline{q} \parallel \underline{c}$ der Impuls $\hbar\underline{q}$ zwischen 5 eV und 20 eV um maximal 7° außerhalb der Schichtebene. Für den Fall $\underline{q} \perp \underline{c}$ ist die Richtungsänderung von $\underline{q}$ (ΔE) so, daß der abgegebene Impuls $\hbar\underline{q}$ immer senkrecht zur c-Achse bleibt.

4.2. Meßdaten und Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$.

4.2.1. Verlustmöglichkeiten

In den untersuchten Energiebereich (2 - 30 eV) muß man drei Verlustmechanismen berücksichtigen:

1. Den Volumenverlust, entstanden durch Anregung longitudinaler Schwingungen der Kristallelektronen im Volumen,
2. den Oberflächenverlust, entstanden durch Anregung transversaler Oberflächenschwingungen,
3. den Strahlungsverlust, entstanden durch Cerenkovstrahlung.

Um der Schwierigkeit zu entgehen, die Beiträge der drei verschiedenen Mechanismen in dem gemessenen Verlustspektrum zu trennen, wurden die Verlustmessungen an relativ stark gestreuten Elektronen ($\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad) durchgeführt. Bei großen Streuwinkeln kann man die Oberflächenverluste und die Strahlungsverluste gegenüber den Volumenverlusten vernachlässigen [1].

4.2.2. Verlustwahrscheinlichkeiten

Die Wahrscheinlichkeit von Volumenverlusten läßt sich in einem relativ übersichtlichen Ausdruck darstellen, weil durch die spezielle Wahl der Richtung des abgegebenen Impulses $\hbar\underline{q}$ die Beiträge von $\varepsilon_{\parallel c}$ und $\varepsilon_{\perp c}$ getrennt werden können und wir so eine Formel benützen können, die der Formel für optisch isotrope Kristalle analytisch

gleicht (siehe Einführung) [3, 14]:

$$P(\Delta E, \underline{\vartheta}) d\Delta E\, d\Omega = \left(\frac{e}{\pi \hbar v}\right)^2 Im\left(-\frac{1}{\varepsilon_{II,\perp}}\right) \cdot D \cdot \frac{1}{\underline{\vartheta}^2 + \vartheta_E^2}\, d\Delta E\, d\Omega$$

e = Elementarladung, v = Geschwindigkeit der einfallenden Elektronen, D = durchquerte Schichtstrecke, $\vartheta_E = \frac{\Delta E}{2E_0}$, E_0 = Primärenergie, $\underline{\vartheta} = (\vartheta, \varphi)$.
Hier wird die Wahrscheinlichkeit $P(\Delta E, \underline{\vartheta}) d\Delta E d\Omega$ dafür angegeben, daß ein Elektron einen Volumenverlust in einem infinitesimalen Bereich um ΔE erleidet und dabei unter dem Winkel $\underline{\vartheta}$ in den infinitesimalen Raumwinkel $d\Omega$ gestreut wird.

4.2.3. Verlustintensitäten

Um aus den Messungen Im $1/\varepsilon$ zu erhalten, muß ein Zusammenhang zwischen gemessener Verlustintensität und theoretischer Verlustwahrscheinlichkeit hergestellt werden. Folgende Gesichtspunkte sollen dabei diskutiert werden:

Mehrfachverluste
Intensität der verlustlosen Elektronen
Energieunschärfe der verlustlosen Elektr.
Energieauflösung des Analysators
Strahldivergenz der verlustlosen Elektr.
Winkelakzeptanz des Analysators.

4.2.3.1. Mehrfachverluste

Die Möglichkeit von Mehrfachverlusten wurde bei unserer Auswertung nicht berücksichtigt. Der Doppelverlust des einfachen Hauptverlustes wurde in den Spektren beobachtet (siehe 5.8.). Er liegt außerhalb des verwerteten

Energiebereiches und ist so schwach, daß wohl alle anderen wesentlich geringeren Verlustintensitäten keine zu berücksichtigenden Doppelverlustbeiträge innerhalb des verwerteten Energiebereiches hervorrufen.

4.2.3.2. Intensität der verlustfreien Elektronen

Bei der Festlegung der Verlustwahrscheinlichkeit muß man die Intensität I_V der Elektronen, die tatsächlich einen Volumenverlust erlitten haben, mit der Intensität I_o der Elektronen vergleichen, die die Möglichkeit hatten, einen Verlust in Analysatorrichtung zu erleiden.

I_o kann nun nicht die Intensität der auf die Schicht eintreffenden Elektronen sein. Denn viele Elektronen werden durch andere, hauptsächlich elastische Prozesse in Richtungen gestreut, aus denen keine Verlustbeiträge in Analysatorrichtung zu erwarten sind. Im allgemeinen wird nun bei Poly- wie bei Einkristallen angenommen, daß Elektronen vor und nach einem Volumenverlust mit gleicher Wahrscheinlichkeit durch andere Streuprozesse in nicht beobachtete Richtungen gestreut werden [1]. Dann wird die Wahrscheinlichkeit eines Volumenverlustes durch das Verhältnis $\frac{I_V}{I_o+I_V}$ beschrieben, wobei I_o und I_V die gemessene elastische bezw. unelastische Intensität nach Passieren der Schicht sind. Für unsere Experimente gilt $I_V \ll I_o$, also

$$P \propto \frac{I_V}{I_o}$$

Diese Überlegungen treffen nur für rißfreie Schichten zu, da sonst I_o zum Teil von Elektronen stammt, die keine Möglichkeit hatten, einen Volumenverlust zu erleiden.

4.2.3.3. Faltung mit Schicht- und Apparatureigenschaften

Der Zusammenhang zwischen der Wahrscheinlichkeit des Volumenverlustes $P(\Delta E, \vartheta)$ und der gemessenen Verlustintensität $I_V(\Delta E, \vartheta)$ wird nicht nur von der verlustlosen Intensität I_o bestimmt. Endliche Winkel- und Energieschärfen verlangen bei der Berechnung von $I_V(\Delta E, \vartheta)$ aus I_o und $P(\Delta E, \vartheta)$ Faltungen mit Schicht- und Apparatureigenschaften (Abb. 24).

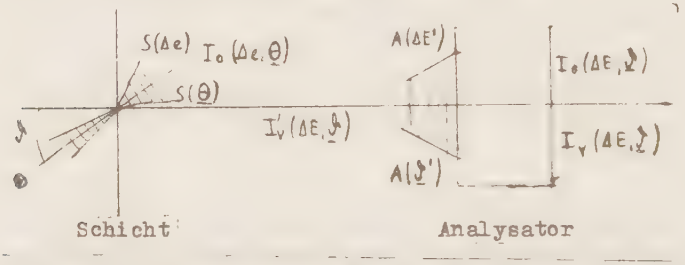


Abb.24: Zur Lokalisierung der im Text verwendeten Größen

Der elastische Strahl nach der Schicht wird durch die normierte Energieverteilungsfunktion $S(\Delta e)$ und die normierte Winkelverteilungsfunktion $S(\underline{\Theta})$ beschrieben, wobei Δe die Abweichung von der Primärenergie, Θ die Abweichung von der Strahlrichtung beschreibt. Die Intensität der elastischen Elektronen hinter der Schicht ist dann:

$$I_o(\Delta e, \Theta) = I_o \cdot S(\Delta e) \cdot S(\underline{\Theta})$$

Hierbei ist eine Abhängigkeit vom Schichtort vernachlässigt und angenommen, daß die Energie- und Winkelabhängigkeit voneinander unabhängig sind. Die Intensität $I_V'(\Delta E, \vartheta)$ hinter der Schicht läßt sich dann durch

Faltung mit P berechnen:

$$I_V'(\Delta E, \underline{\vartheta}) = I_0 \int_{\Delta E''} \int_{\underline{\vartheta}''} S(\Delta E - \Delta E'') \cdot S(\underline{\vartheta} - \underline{\vartheta}'') \cdot P(\Delta E'', \underline{\vartheta}'') \, d\Delta E'' \, d\Omega''$$

Die hinter dem Analysator beobachtete Verlustintensität erhält man durch Faltung von I_V' ($\Delta E, \underline{\vartheta}$) mit den Winkel- und Energieverteilungsfunktionen A ($\underline{\vartheta}'$) und A ($\Delta E'$) des Analysators (wieder keine Ortsabhängigkeit):

$$I_V(\Delta E, \underline{\vartheta}) = I_0 \int_{\Delta E'} \int_{\underline{\vartheta}'} A(\Delta E') \cdot A(\underline{\vartheta}') \cdot I_V'(\Delta E - \Delta E', \underline{\vartheta} - \underline{\vartheta}') \, d\Delta E' \, d\Omega'$$

$$= I_0 \int_{\Delta E'} \int_{\underline{\vartheta}'} \int_{\Delta E''} \int_{\underline{\vartheta}''} A(\Delta E') \cdot A(\underline{\vartheta}') \cdot S(\Delta E - \Delta E' - \Delta E'') \cdot S(\underline{\vartheta} - \underline{\vartheta}' - \underline{\vartheta}'') \cdot P(\Delta E'', \underline{\vartheta}'') \cdot d\Delta E'' \, d\Omega'' \, d\Delta E' \, d\Omega'$$

P ($\Delta E, \underline{\vartheta}$) ist dem Produkt $\mathrm{Im}\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{q}) \frac{1}{\vartheta^2 + \vartheta_E^2}$ proportional. Näherungsweise kann man nun annehmen, daß innerhalb der Winkelhalbwertsbreite $\Delta\vartheta$ der $\mathrm{Im}\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{q}(\underline{\vartheta}, \Delta E))$ innerhalb der Energiehalbwertsbreite EHB der Ausdruck $(\underline{\vartheta}^2 + \vartheta_E^2)^{-1}$ sich wenig ändert. Jetzt zerfällt das Integral in das Produkt:

$$I_V(\Delta E, \underline{\vartheta}) = \frac{e^2 D \, I_0}{\pi^2 \hbar^2 v^2} \int_{\Delta E'} \int_{\Delta E''} A(\Delta E') \cdot S(\Delta E - \Delta E' - \Delta E'') \cdot \mathrm{Im}\left(-\varepsilon^{-1}(\Delta E'', \underline{\vartheta})\right) d\Delta E'' \, d\Delta E'$$

$$\cdot \int_{\underline{\vartheta}'} \int_{\underline{\vartheta}''} A(\underline{\vartheta}') \cdot S(\underline{\vartheta} - \underline{\vartheta}' - \underline{\vartheta}'') \cdot (\underline{\vartheta}''^2 + \vartheta_E^2)^{-1} \, d\Omega'' \, d\Omega'$$

Die Kenntnis von Winkel- und Energieverteilungsfunktionen ist nun zur weiteren Rechnung notwendig. Sie lassen sich von Schicht und Analysator nicht getrennt messen. Dagegen lassen sich die elastischen Verteilungsfunktionen I_0 ($\underline{\vartheta}$) und I_0 (ΔE) hinter dem Analysator

messen. Sie entstehen durch Faltung von S und A.
Nun gilt:

$$\text{Mit:}\quad I_0(\underline{\vartheta}) = \int_{\underline{\vartheta}'} A(\underline{\vartheta}')\cdot S(\underline{\vartheta}-\underline{\vartheta}')\,d\Omega' \,,\quad I_0(\Delta E) = \int_{\Delta E'} A(\Delta E')\cdot S(\Delta E-\Delta E')\,d\Delta E'$$

$$I_V(\Delta E,\underline{\vartheta}) = \frac{e^2 D\cdot I_0}{\pi^2 \hbar^2 v^2}\cdot \int_{\Delta E''} I_0(\Delta E-\Delta E'')\cdot Im\left(-\varepsilon^{-1}(\Delta E'',\underline{\vartheta})\right) d\Delta E''$$

$$\cdot \int_{\underline{\vartheta}''} I_0(\underline{\vartheta}-\underline{\vartheta}'')\cdot\left(\underline{\vartheta}''^2+\vartheta_E^2\right)^{-1} d\Omega''$$

Wir haben hier einen Ausdruck für I_V erhalten, den schon Daniels [15] angegeben hat, wobei aber bei Daniels die getrennte Berücksichtigung der Eigenschaften von Schicht und Apparatur nicht ersichtlich ist.

Bei den nicht sehr scharfen Strukturen der Verlustfunktionen von Selen und Tellur kann man annehmen, daß der $Im\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ sich wenig innerhalb der Energiehalbwertsbreite der Apparatur ändert. Damit läßt sich die Verlustfunktion $Im\,\varepsilon^{-1}$ aus dem Integral herausziehen:

$$I_V(\Delta E,\underline{\vartheta}) = \frac{e^2 D\, I_0\, Im\,\varepsilon^{-1}(\Delta E,\underline{\vartheta})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} \int_{\Delta E''} I_0(\Delta E'')\,d\Delta E'' \int_{\underline{\vartheta}''} I_0(\underline{\vartheta}-\underline{\vartheta}'')\cdot\left(\underline{\vartheta}''^2+\vartheta_E^2\right)^{-1} d\Omega''$$

Jetzt läßt sich $Im\,\varepsilon^{-1}(\Delta E,\underline{\vartheta})$ aus meßbaren Größen berechnen:

$$Im\,\varepsilon^{-1}(\Delta E,\underline{\vartheta}) = \frac{\pi^2\hbar^2 v^2}{e^2 D}\cdot\frac{I_V(\Delta E,\underline{\vartheta})}{I_0}\cdot\left[\int_{\Delta E'} I_0(\Delta E')\,d\Delta E'\cdot\int_{\underline{\vartheta}'} I_0(\underline{\vartheta}')\left((\underline{\vartheta}-\underline{\vartheta}')^2+\vartheta_E^2\right)^{-1} d\Omega'\right]^{-1}$$

Zwei Integrale sind zu berechnen: Das Integral $\int_{\Delta E'} I_0(\Delta E')\,d\Delta E'$ ist die Integration der normierten Primärlinie $I_0(\Delta E)$ des Spektrums. In erster Näherung ergibt sich die Energiehalbwertsbreite (EHB). Das Winkelfaltungsintegral, das wir jetzt $F(\Delta E)$ nennen, muß zum Gebrauch noch etwas

umgeformt werden. Mit $\underline{\vartheta} = (\vartheta, \varphi)$ und $\vartheta_E = \frac{\Delta E}{2 E_0}$ kann man umformen:

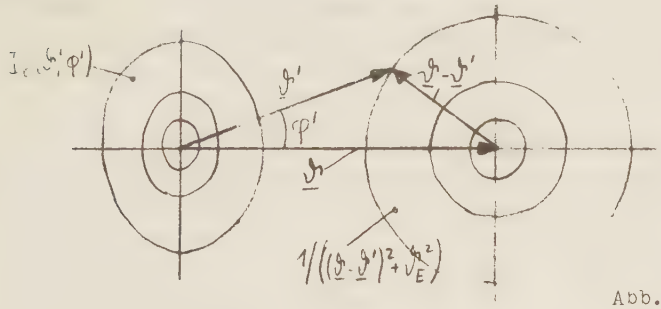


Abb. 25

$$F(\Delta E) = \int_{\vartheta'} \int_{\varphi'} I_0(\vartheta', \varphi') \cdot \left(\vartheta^2 + \vartheta'^2 - 2\vartheta\vartheta' \cos\varphi' + \frac{\Delta E^2}{4E_0^2}\right)^{-1} \vartheta' \, d\vartheta' \, d\varphi'$$

Messungen ergaben, daß sich $I_0(\vartheta', \varphi')$ allein durch Messung von $I_0(\vartheta', 0)$ und $I_0(\vartheta', \pi/2)$ festlegen läßt. Die Werte für φ' zwischen 0 und $\pi/2$ wurden linear interpoliert, die anderen Funktionswerte ergeben sich aus der Tatsache, daß der Ursprung ein Inversionszentrum ist:

$$F(\Delta E) = 2 \int_{\vartheta'=0}^{\vartheta_c > \vartheta} \int_{\varphi'=0}^{\pi/2} \left[I_0(\vartheta', 0) + \frac{2}{\pi} \left(I_0(\vartheta', \pi/2) - I_0(\vartheta', 0) \right) \varphi' \right]$$
$$\cdot \left[\left(\vartheta^2 + \vartheta'^2 - 2\vartheta\vartheta' \cos\varphi' + \frac{\Delta E^2}{4E_0^2}\right)^{-1} + \left(\vartheta^2 + \vartheta'^2 - 2\vartheta\vartheta' \cos(\varphi + \pi') + \frac{\Delta E^2}{4E_0^2}\right)^{-1} \right] \vartheta' \, d\vartheta' \, d\varphi'$$

Die Berechnung von $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \vartheta) = \frac{\pi^2 \hbar^2 v^2}{e^2 D} \cdot \frac{I_0(\Delta E, \vartheta)}{I_0} \cdot \frac{1}{\int I_0(\Delta E') d\Delta E' \cdot F(\Delta E)}$

wurde in Algol-Sprache programmiert (siehe Anhang) und auf der Rechenmaschine TR440 des Leibniz-Rechenzentrums, München durchgeführt. Die numerischen Winkelfaltungen wurden mit solchen Schrittweiten $\Delta\vartheta$ und $\Delta\varphi$ gerechnet, daß die Fehler wegen der endlichen Größe von $\Delta\Omega$ vernachlässigbar waren ($\Delta\vartheta = 5 \cdot 10^{-5}$ rad, $\Delta\varphi = 9°$).

Zum Test des Winkelfaltungsintegrals wurde an einer Aluminiumfolie die Verlustintensität I_V (15 eV, ϑ) des Plasmonmaximums für verschiedene Streuwinkel ϑ gemessen und der $Im\varepsilon^{-1}$ (15 eV, ϑ) in willkürlichen Einheiten berechnet:

ϑ	$Im\varepsilon^{-1}$ (15 eV)
0	7,7
$5{,}5 \cdot 10^{-4}$ rad	8,2
$7{,}6 \cdot 10^{-4}$ rad	8,6
$1 \cdot 10^{-3}$ rad	7,9

Die relativ kleinen Schwankungen von ± 5 % zeigen, daß das Winkelfaltungsintegral die Streuwinkelabhängigkeit der Verlustintensität gut beschreibt.

Beim Test wurde festgestellt, daß die Winkelverteilungsfunktion trotz ihres starken Abfalls mit dem Streuwinkel noch bis zu Streuwinkeln bekannt sein muß, die bei $1 \cdot 10^{-3}$ rad liegen. Nur so kann das Faltungsintegral für Verluste bei $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad genau berechnet werden. Denn auch kleine Primärintensitäten bei $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad erleiden meßbare Verluste in die gleiche Richtung wegen der großen Anregungswahrscheinlichkeit.

Um den Einfluß des Winkelfaltungsintegrals F (Δ E) auf die Korrektur der Spektren zu verdeutlichen, haben wir in Abb. 26 F (Δ E, $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad) für eine typische Winkelverteilungsfunktion (gemessen an einer Al-Schicht, $\Delta\vartheta \approx 2{,}8 \cdot 10^{-4}$ rad) dargestellt.

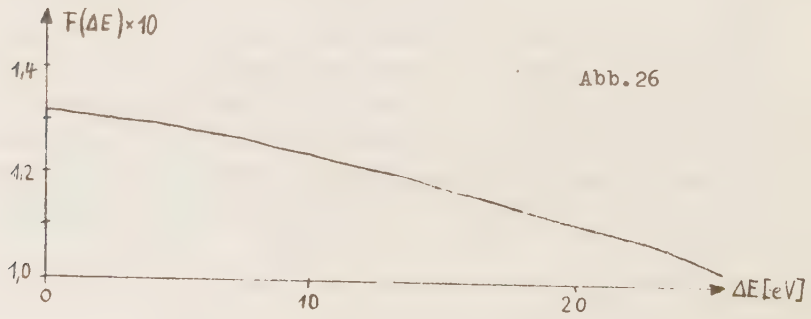


Abb. 26

4.3. Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ und optische Daten

Um die Ergebnisse der Energieverlustmessungen mit denen von Energiebandrechnungen und optischen Experimenten zu vergleichen, wurden aus der Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ die komplexe Dielektrizitätskonstante $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, der komplexe Brechungsindex $\tilde{n} = n + ik$ und die Reflektivität $R(\Delta E)$ berechnet.

4.3.1. Kramers-Kronig-Analyse

Kennt man die Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ für alle ΔE, wo $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E) > 0$ ist, so läßt sich mit Hilfe der Dispersionsrelation der Realteil $\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ berechnen [16]:

$$\mathrm{Re}\left(\varepsilon^{-1}(\Delta E)\right) - 1 = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E')}{\Delta E' - \Delta E}\, d\Delta E'$$

P bedeutet, daß der Hauptwert des Integrals gebildet werden soll.

Mit der Beziehung $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(-\Delta E, \underline{q}) = -\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{q})$ kann für $|\underline{q}| = 0$ die Integration über negative Energien vermieden werden. Weil Betrag und Richtung von $\underline{q}(\underline{\hat{v}}, \Delta E)$ auch von ΔE abhängen, gilt für $|\underline{q}| \neq 0$ im allgemeinen:

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(-\Delta E, \underline{q}(-\Delta E)) \neq -\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{q}(\Delta E)),$$

unabhängig davon, ob der untersuchte Kristall optisch isotrop oder anisotrop ist.*) Vielmehr erhält man mit der Umformung $\underline{q}(-\Delta E, \underline{\hat{v}}) = -\underline{q}(\Delta E, -\underline{\hat{v}})$ einen Ausdruck für $\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{\hat{v}})$, der die Messung . . . . . .

*) Die Feststellung, daß die Ungleichung auch für optisch isotrope Kristalle gilt, verdanke ich Herrn Prof. Dr. H. Bross.

von zwei Spektren $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{\vartheta})$ und $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, -\underline{\vartheta})$ notwendig macht [17, 18]:

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{\vartheta}) - 1 = \frac{1}{\pi} P \int_0^\infty \left(\frac{\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E', \underline{\vartheta})}{\Delta E' - \Delta E} + \frac{\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E', -\underline{\vartheta})}{\Delta E' + \Delta E} \right) d\Delta E'$$

Bei unseren Messungen unterschieden sich wegen des großen Streuwinkels $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad und der relativ geringen Anisotropie die Spektren $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, \underline{\vartheta})$ und $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, -\underline{\vartheta})$ nur wenig ($\underline{q} \parallel \underline{c}$) oder gar nicht ($\underline{q} \perp \underline{c}$). Der Beitrag des zweiten Integralterms ist dazu im allgemeinen kleiner als der des ersten. Wir verzichteten deshalb auf die Messungen von $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E, -\underline{\vartheta})$ und benützten die Beziehung [19]:

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}_{\parallel,\perp}(\Delta E, \underline{\vartheta}) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\Delta E' \cdot \mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}_{\parallel,\perp}(\Delta E', \underline{\vartheta})}{\Delta E'^2 - \Delta E^2} d\Delta E'$$

Zur numerischen Auswertung wurde zum Teil ein Algol-Programm von Skibowski [19] übernommen (siehe Anhang). Das Integral wird für äquidistante Stützstellen von $\Delta E'$ mit dem Abstand H berechnet. Beim Einlesen der Meßwerte wurde für H eine Schrittweite von 0,25 eV benützt. Zur Integralberechnung konnte H durch eine interne lineare Interpolation beliebig verkleinert werden. Der Polbeitrag des Integranden ist folgendermaßen angenähert [19]:

$$\int_{\Delta E - H}^{\Delta E + H} \frac{\Delta E' \mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E')}{\Delta E'^2 - \Delta E^2} d\Delta E' = \frac{(\Delta E + H) \cdot \mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E + H)}{(\Delta E + H) + \Delta E} - \frac{(\Delta E - H) \cdot \mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E - H)}{(\Delta E - H) + \Delta E}$$

Die zuvor aus den Verlustintensitäten berechnete Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ wurde von ca. 30 eV bis 50 eV proportional ΔE^{-3} extrapoliert. Die Form der Extrapolation ist für die Ergebnisse von o - 25 eV relativ unkritisch.

4.3.2. Realteil $\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}$ und optische Daten

Aus dem Realteil $\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}$ sind nun auf einfache Weise die optischen Konstanten zu erhalten:

$$\varepsilon_1 = \frac{\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}}{(\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1})^2 + (\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1})^2}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{-\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}}{(\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1})^2 + (\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1})^2}$$

$$\tilde{n} = \sqrt{\varepsilon} = n + ik$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$

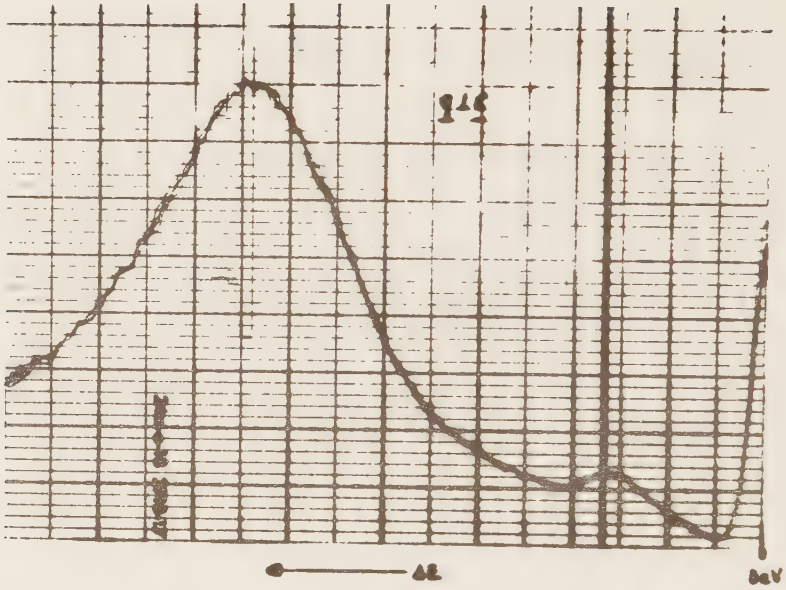
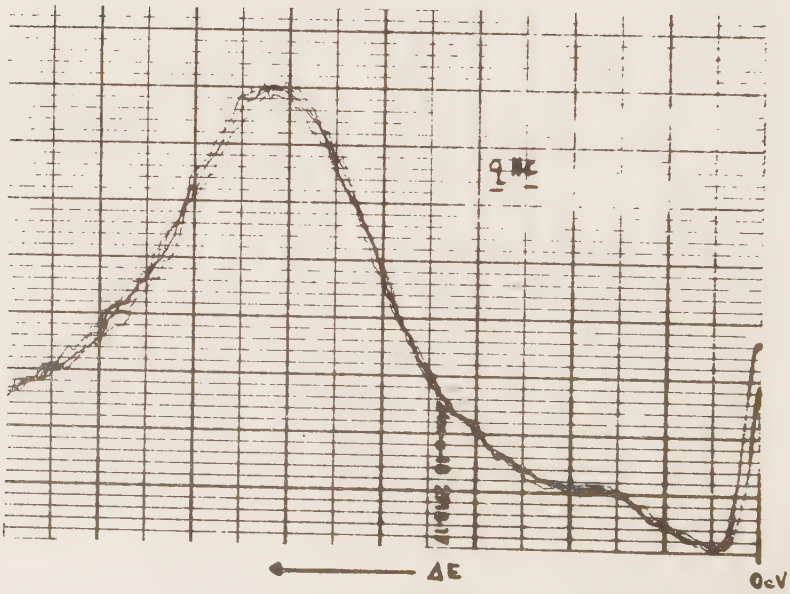
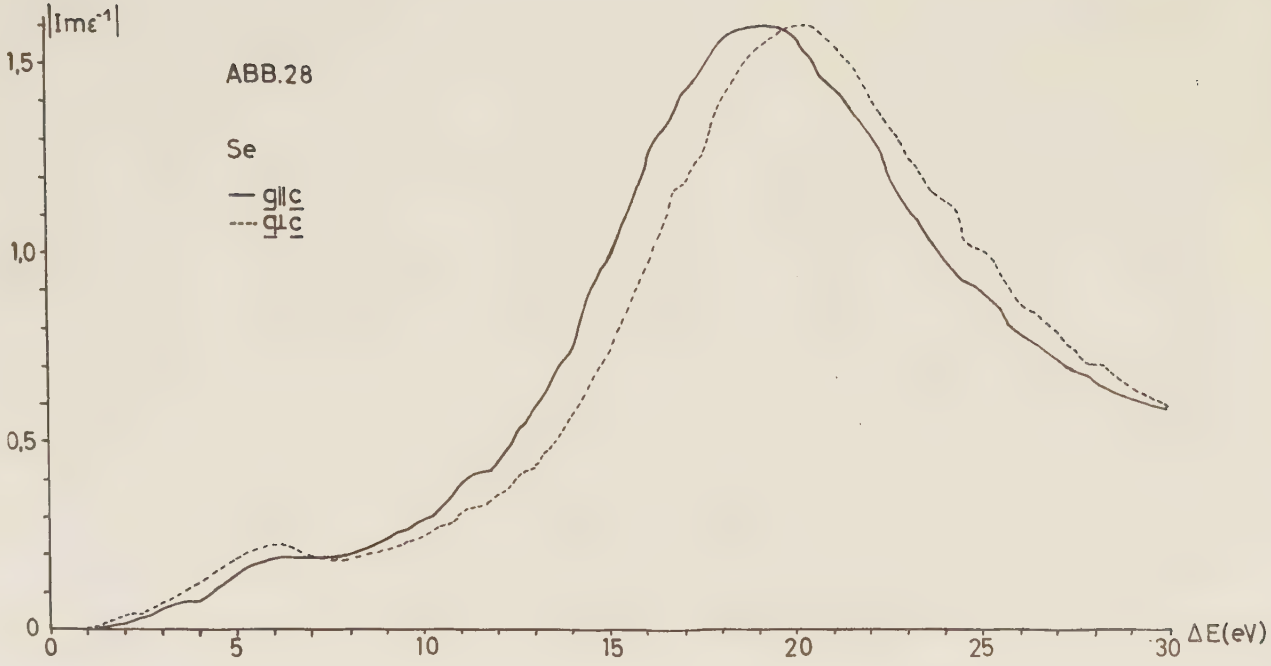


Abb.27: Originalspektren von Selen




|Imε⁻¹|
ABB.28
Se
— ⊥c
---- ∥c
1,5
1,0
0,5
0
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)

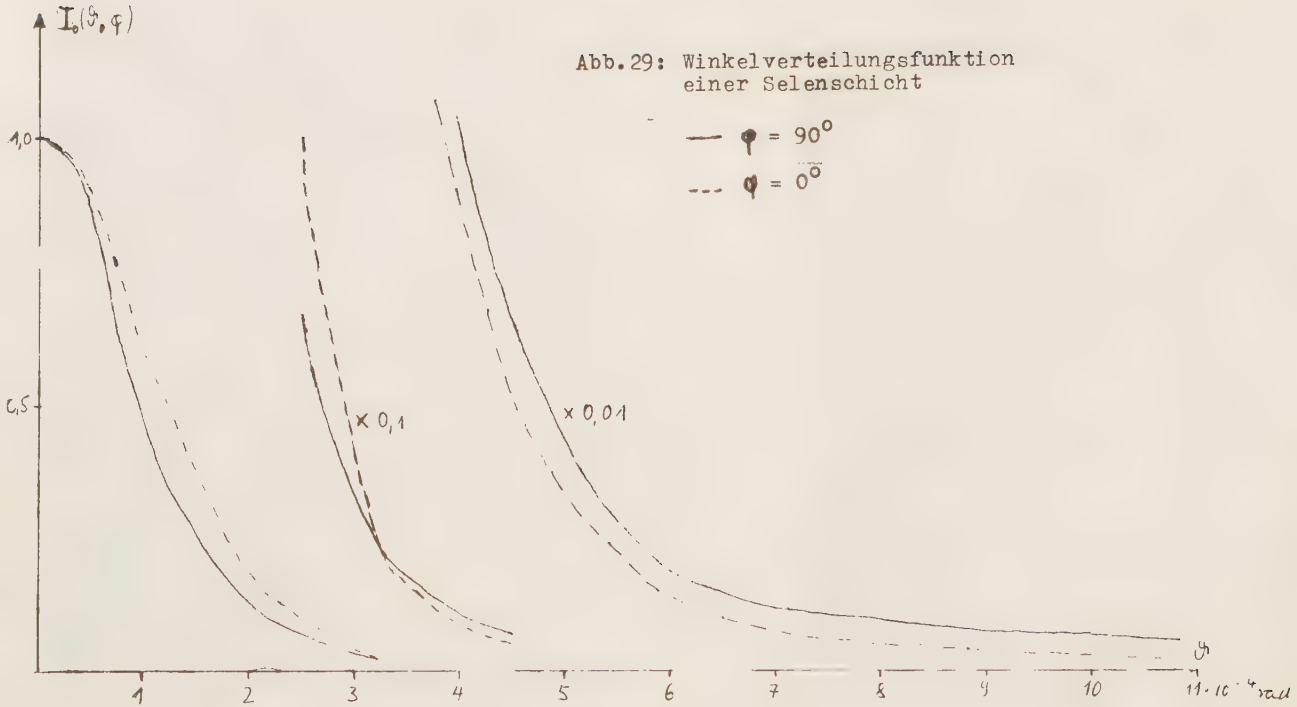


Abb. 29: Winkelverteilungsfunktion einer Selenschicht

5. Ergebnisse bei Selen

Die Energieverlustmessungen wurden an 5 einkristallinen und an 2 amorphen Selenschichten vorgenommen. Fünf der Schichten waren freitragend präpariert, zwei einkristalline Schichten waren mit einer Stützschicht aus Zapponlack bedeckt. Der Einfluß der Zapponlackschicht auf die Verlustintensität der Selen-Zapponlackschicht war gering. Reine Zapponlackschichten zeigten ein breites, unstrukturiertes Maximum bei 19 eV mit einer Intensität von 5 % der Selenschicht.

5.1. $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ *) und $\underline{q} \perp \underline{c}$.

Originale Energieverlustspektren von Selen, wie sie zur Auswertung verwendet wurden, werden in Abb. 27 gezeigt. Jedes Spektrum wurde mehrfach registriert und zur Auswertung aufeinander gezeichnet, um Intensitätsschwankungen während der (halbstündigen) Messung eines Spektrums eliminieren zu können. Die Spektren wurden bei einem Streuwinkel von $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad aufgenommen.

Diese Verlustspektren geben noch nicht genau den Verlauf der Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ wieder. Um die Verlustfunktion zu erhalten, wurden zu jeder Spektrenmessung die Energie- und Winkelverteilungsfunktionen aufgenommen. Die Faltung (4.2.3.3.) mit diesen Funktionen ergibt die Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ (Abb. 28). Die Ver-

*) Nur bei einem Energieverlust von 13 eV ist $\underline{q}$ exakt parallel zur c-Achse (siehe 4.1.). Um zu prüfen, ob die Abweichungen von der Parallelität bei anderen Energien das Verlustspektrum ändern, wurde für eine CEV-Messung die Schicht um einige Grad verkippt. Es traten keine meßbaren Veränderungen auf.

lustfunktion von Selen zeigt eine nicht sehr stark ausgeprägte Anisotropie über den ganzen Energiebereich bis 30 eV. Für beide Richtungen weist die Verlustfunktion ein beherrschendes Maximum um 20 eV auf, dem ein kleines Maximum oder eine Schulter um 6 eV vorgela-

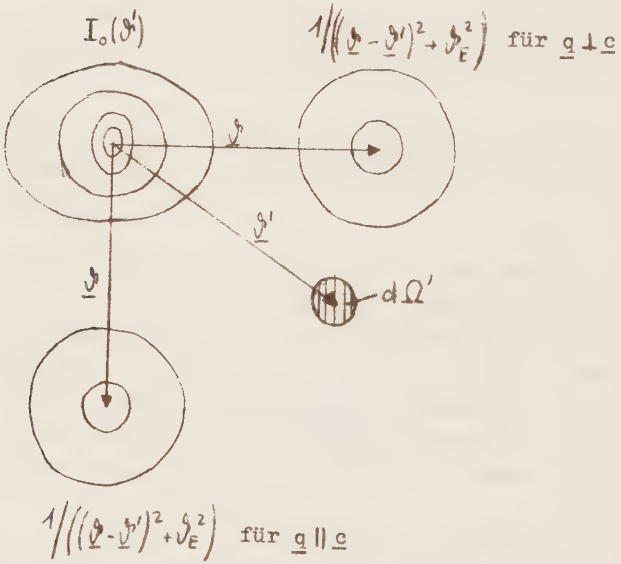


Abb. 30: Die Funktionen $I_o\ (\underline{\hbar\omega}')$ und $((\underline{\hbar\omega}-\underline{\hbar\omega}')^2+\hbar\omega_E^2)^{-1}$ sind durch Linien gleicher Größe dargestellt. Die Funktion $((\underline{\hbar\omega}-\underline{\hbar\omega}')^2+\hbar\omega_E^2)^{-1}$ liegt für die Fälle $\underline{q}\parallel\underline{c}$ und $\underline{q}\perp\underline{c}$ an verschiedenen Stellen der $\underline{\hbar\omega}$-Ebene.

gert ist. Diesem Hauptverlauf sind wesentlich kleinere Strukturen aufgesetzt, die die Größenordnung von apparativen Intensitätsschwankungen während der Messung haben (Abb. 27). Die Strukturen bei 2,2 eV, 11 eV, 12,5 eV, 16,8 eV, 24,2 eV, 25 eV und 28 eV für $\underline{q} \perp \underline{c}$ und bei 3,5 eV, 11,5 eV und 16,4 eV für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ dürften aber wegen ihres Auftretens bei den meisten Messungen gesichert sein.

Die Hauptmaxima für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ und für $\underline{q} \perp \underline{c}$ waren in den Originalspektren innerhalb der Meßgenauigkeit gleich hoch. Die Berechnung des Winkelfaltungsintegrals (siehe 4.2.3.3.)

$$F = \int \frac{I_0(\underline{\vartheta}')}{(\underline{\vartheta} - \underline{\vartheta}')^2 + \vartheta_E^2} \, d\Omega'$$

ergab, daß auch die Maxima der Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ für beide Richtungen gleich hoch sind. Das ist durchaus nicht selbstverständlich, weil die Winkelverteilungsfunktion $I_0(\underline{\vartheta}) = I_0(\vartheta, \varphi)$ nicht unabhängig von φ und damit F nicht unabhängig von $\underline{q}(\vartheta, \varphi)$ ist. Eine kleine Asymmetrie der apparativen Winkelverteilungsfunktion $A(\underline{\vartheta})$ wurde aber so von einer asymmetrischen Kleinwinkelstreuung der Selenschicht $S(\underline{\vartheta})$ überlagert, daß $I_0(\underline{\vartheta})$ (Abb. 29) bei der Faltung mit der unelastischen Streuverteilung $(\underline{\vartheta}^2 + \vartheta_E^2)^{-1}$ praktisch gleich große F-Werte für beide Richtungen ergab (Abb. 30).

An einer Selenschicht wurden Spektren gemessen, die bei kleinen Energien höhere Verlustintensitäten als die anderen Spektren zeigten. Innerhalb von Stunden sank die höhere Verlustintensität aber so, daß die Spektren mit den anderen übereinstimmten. Als Ursache für diese Änderung kommt das Aufwachsen von Fremdschichten nicht in Frage, weil mit wachsender Schichtdicke die Wahrscheinlichkeit eines Volumenverlustes nicht sinken kann. Wir interpretierten deshalb diese anfänglichen Änderungen

der Spektren als Erholvorgänge in der bei der Präparation mechanisch beanspruchten Schicht (eventuell durch Erwärmung im Elektronenstrahl) und schenkten ihnenkeine weitere Aufmerksamkeit.

5.2. Absolutmessungen

Zur absoluten Bestimmung der Werte von $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ wurde von zwei Schichten die Dicke gemessen, wie in 2.2.4. beschrieben. Die Referenzschicht hatte eine Dicke von 1010 Å ± 50 Å. Mit den Werten, die aus der Energieverlustmessung (5.1.) entnommen wurden, ergaben sich für die Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ sehr kleine Werte. Für das Verlustmaximum z.B. war $|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}| = 0{,}2$ bei beiden Schichten. Zur Kontrolle wurde die Verlustintensität auch beim Streuwinkel $\vartheta = 0$ gemessen. Hier ergab sich für das Verlustmaximum der Wert $|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}| = 0{,}19$ in recht guter Übereinstimmung mit dem Ergebnis für $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad. Diese Ergebnisse standen im krassen Widerspruch zu Daten, die aus den optischen Messungen mehrerer Autoren im niederenergetischen Bereich gewonnen worden waren [20, 21] (siehe auch 5.5.).

Deshalb wurden zur Kontrolle an amorphen Selenschichten Absolutmessungen durchgeführt. Bei einer Schichtdicke von 800 Å ± 5 % wurden Verlustintensitäten gemessen, die wesentlich größer als bei einkristallinen Schichten waren. So ergab sich für das Verlustmaximum, das bei 19 eV liegt, der höhere Wert:

$$|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\approx 19\ \mathrm{eV})| = 1{,}60 \text{ für } \vartheta = 1 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$$
$$= 1{,}64 \text{ für } \vartheta = 0$$

Die optischen Konstanten von amorphem und einkristallinem Selen können sich bei der relativ hohen Energie

von 19 eV kaum mehr unterscheiden, weil bei diesen Energien der Einfluß des Kristallgitters gering ist. Deshalb wurden die Absolutwerte des $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ von amorphem Selen bei 19 eV für einkristallines Selen übernommen. Da bei $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad nur Volumenverluste auftreten können, wird der Wert 1,60 benützt.

Zur Erklärung der niedrigen Werte der Verlustfunktion bei einkristallinem Selen kann man folgende Möglichkeiten in Betracht ziehen:

1) Risse in der Schicht
2) Auswirkung der dynamischen Beugungstheorie
3) Falsche Schichtdickenbestimmung

Zu 1) Durch Risse in der Schicht würde eine zu hohe verlustlose Intensität I_o und damit ein zu kleines Verhältnis I_v/I_o gemessen (siehe 4.2.3.2.). Mehrere Tatsachen sprechen aber gegen Risse: Die Schichten zeigten im Lichtmikroskop keinerlei Risse (Im Elektronenmikroskop erlaubten die notwendigen hohen Strahlintensitäten keine Abbildung ohne Rißbildung). Die Winkelverteilungsfunktionen zeigten nicht die schmale Verteilung des Strahles vor der Schicht, sondern die typische Verbreiterung durch Kleinwinkelstreuung an der Schicht, obwohl beinahe die gesamte gemessene Intensität I_o durch die Risse getreten sein müßte. An zwei Schichten wurden innerhalb der Meßschwankungen die gleichen Werte der Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ gemessen, was gleich große Risse in beiden Schichten voraussetzt.

Zu 2) Bei Schichtdicken von 1000 Å ist nach der dynamischen Theorie zu erwarten, daß jedes elastische Elektron mehrfach gestreut wurde. Wenn nun die Wahrscheinlichkeit einer Braggreflexion nach einer

unelastischen Streuung kleiner wäre als vor einer, könnte man zu kleine unelastische Intensitäten messen. Besonders, wenn man unelastische Streuung in große Streuwinkel betrachtet, die weit von der Braggbedingung abweichen, wäre die Annahme 2) weiter zu verfolgen. Bei unseren Schichten ergaben aber Messungen bei $\vartheta = 0$ und $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$rad praktisch gleiche Absolutwerte für die Verlustfunktion. Das muß bedeuten, daß hier Anregungsfehler von $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad noch keinen großen Einfluß auf die elastische Streuung von unelastischen Elektronen haben.

Zu 3) Wenn man nicht einen unbekannten, zusätzlichen, physikalischen Effekt heranziehen will, für den kein Anhaltspunkt gefunden wurde, muß ein Fehler um den Faktor 8 bei Schichtdickenbestimmung vorliegen. Die Ursache muß in den verschiedenen Substraten zu suchen sein, die beim Aufdampfen des Selens benützt wurden. Die zur Tolanskymessung benützte Schicht wurde auf polykristallines Tellur, die andere auf einkristallines Tellur aufgedampft (siehe auch 2.2.4.). Die Substrattemperatur von 115° C liegt knapp unter der Temperatur, bei der sich auf einkristallinem Tellur kein Selen mehr niederschlägt. Die Aufdampfunterlage kann deshalb sicher starken Einfluß auf die Wachstumsgeschwindigkeit und damit die Dicke der Selenschicht haben. Versuche, die Schichtdicke des aufgedampften Selens auf besonders ebenen, einkristallinen Flächen von Tellurkristallen mit der Methode nach Tolansky zu messen, gelangen nur mit dem großen Fehler von $\pm$ 20 %, weil die Tellurflächen noch störende Unebenheiten aufwiesen. Die Berechnung ergab einen Absolutwert $\left|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\approx 19\ \mathrm{eV})\right| = 1{,}65$, der gut mit den Ergebnissen bei amorphem Selen überein-

stimmt und der sich innerhalb seiner Fehlergrenzen nicht mit den Ergebnissen wie $|\mathrm{Im}\varepsilon^{-1}(\approx 19\ \mathrm{eV})| = 0{,}2$ vereinbaren läßt.

Eine direkte Absolutbestimmung des $\mathrm{Im}\varepsilon^{-1}$ von Selen ist also wegen Schwierigkeiten bei der Schichtdickenmessung nicht gelungen. Diese Schwierigkeiten gibt es bei amorphen Schichten nicht, da hier keine Substratunterschiede vorhanden sind. Damit wird die Entscheidung für die Verwendung der Absolutwerte von $\mathrm{Im}\varepsilon^{-1}$ der amorphen Schichten bekräftigt.

Abgesehen von dem unbekannten Fehler, der durch die Gleichsetzung des $\mathrm{Im}\varepsilon^{-1}$ (≈ 19 eV) von amorphem und einkristallinem Selen entsteht, ist der maximale Fehler des Absolutwertes bei 19 eV $\pm$ 15 %. Der Fehler bei der Messung der Verlustintensität, der Winkelverteilungsfunktion und der Schichtdicke tragen mit je 5 % dazu bei.

5.3. Optische Konstanten

Wegen der endlichen Energieauflösung ist es nicht möglich, die Verlustspektren ab 0 eV zu messen. Zur Berechnung der optischen Konstanten mit Hilfe der Kramers-Kronig-Analyse ist die Kenntnis der Verlustfunktion aber bis 0 eV notwendig. Die Spektren mußten deshalb bis 0 eV extrapoliert werden. wie es in Abb. 28 schon geschehen ist. Um den Intensitätsanteil der verlustlosen Elektronen im Gebiet bei 0 eV zu erhalten (Abb. 31), wird die Tatsache benützt, daß die Intensitätsverteilung der elastischen Elektronen um 0 eV symmetrisch ist. So können wir die elastische Intensität von der gemesse-

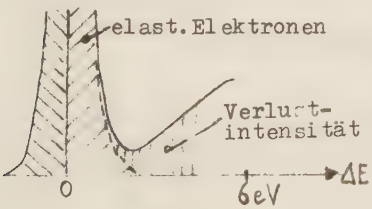
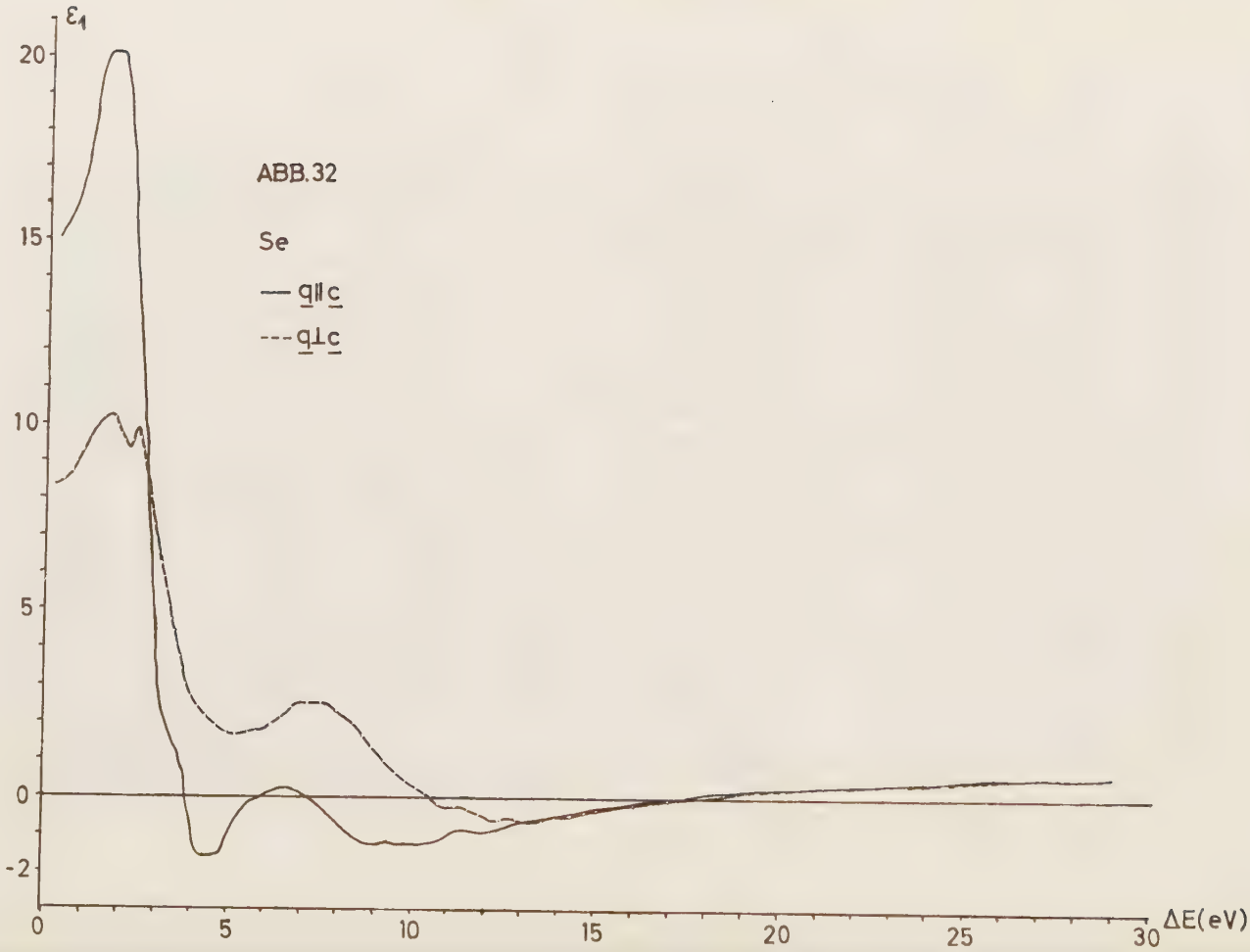
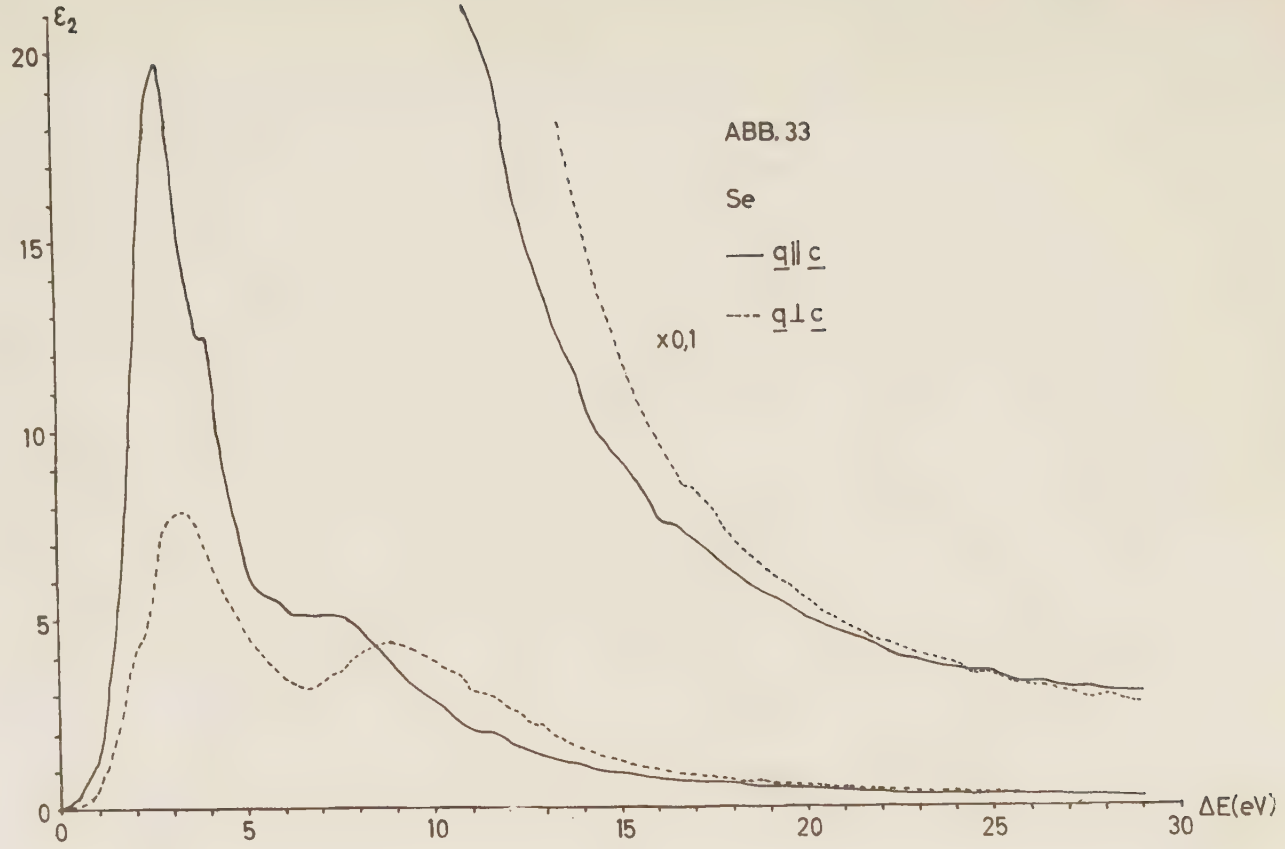
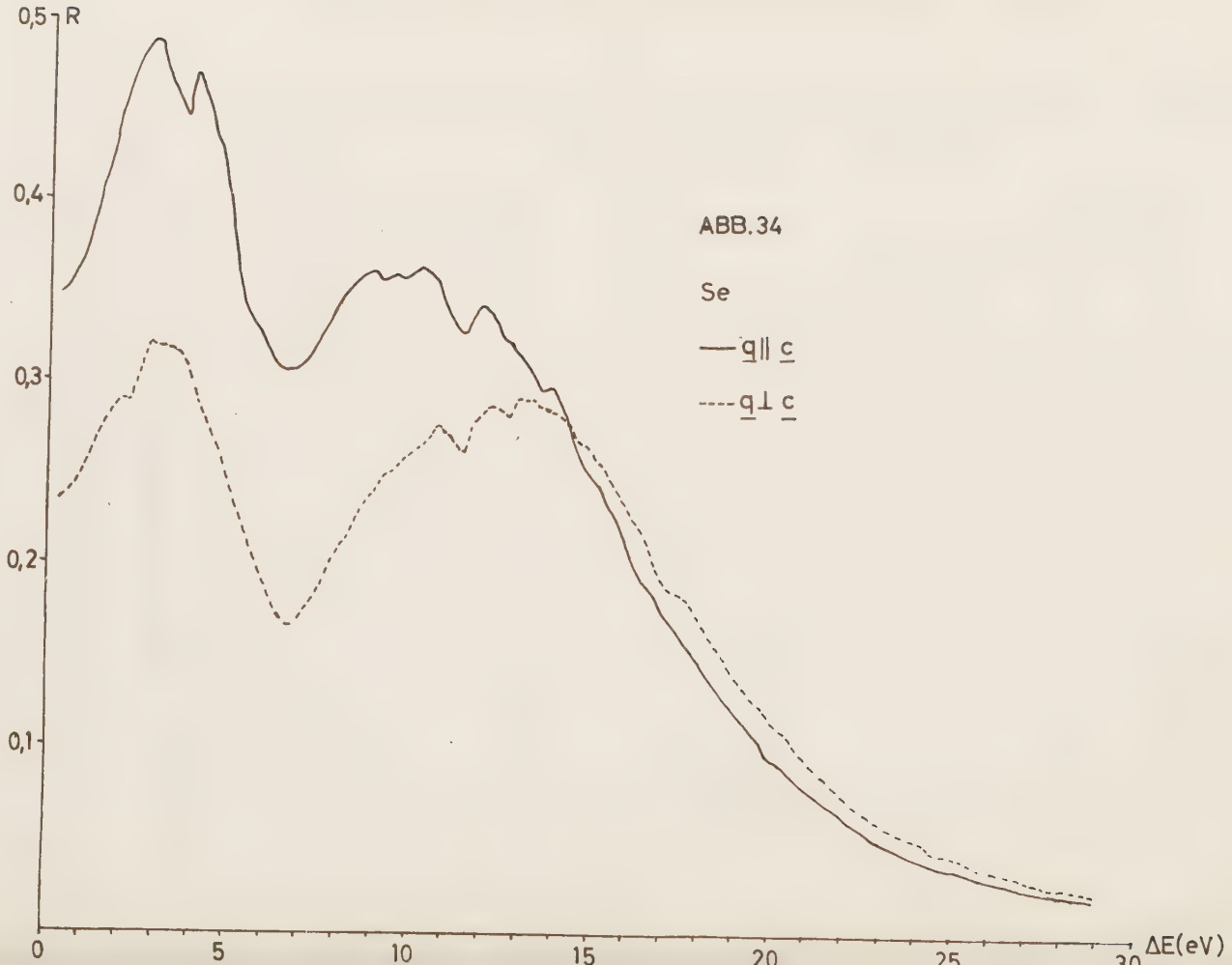


Abb. 31


ε1
20
15
10
5
0
-2
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)
ABB.32
Se
— q∥c
--- q⊥c


ε2
20
15
10
5
0
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)
ABB. 33
Se
q ∥ c
q ⊥ c
x0,1


0,5
R
0,4
0,3
0,2
0,1
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)
ABB. 34
Se
—— c ∥ b
---- c ⊥ b

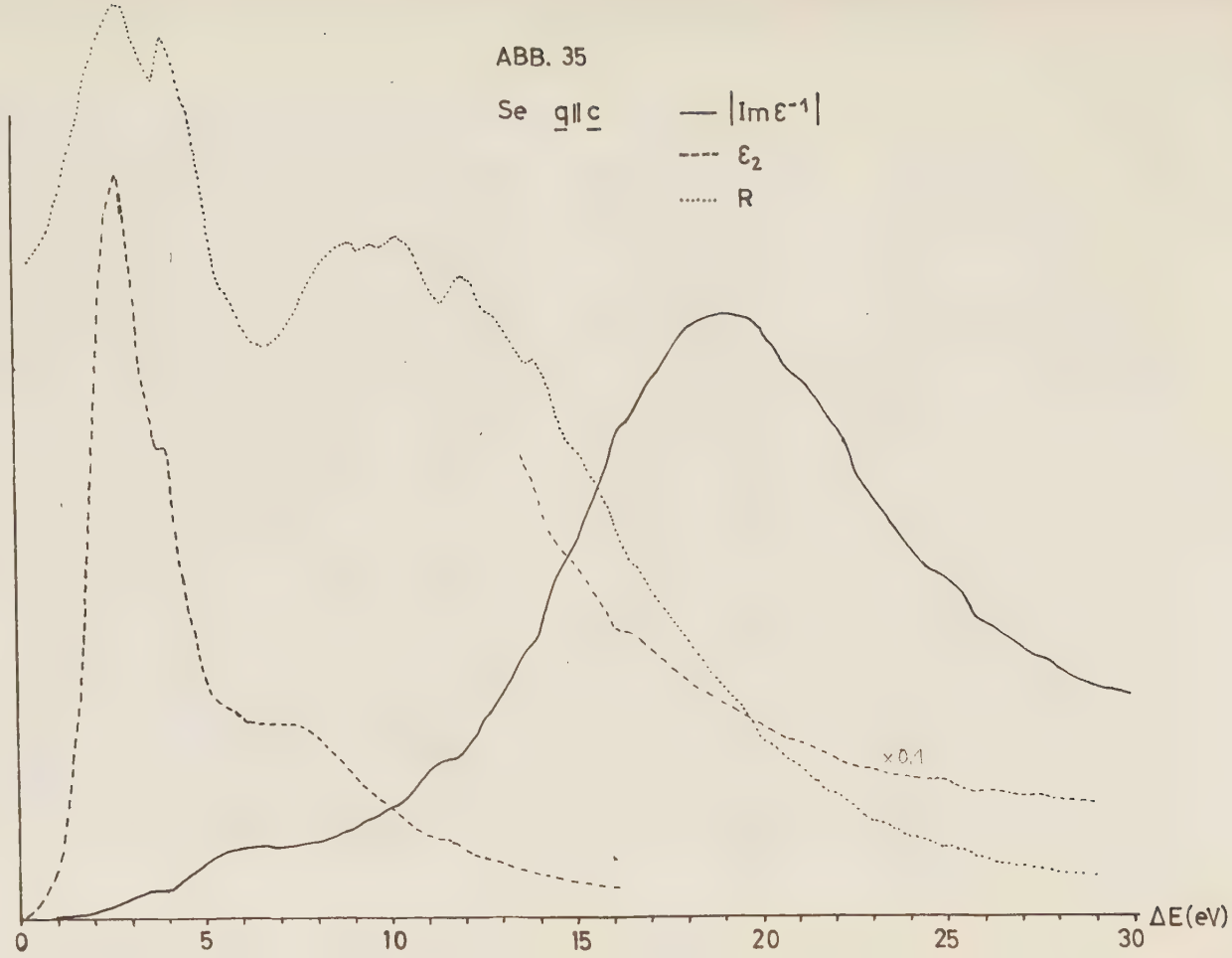
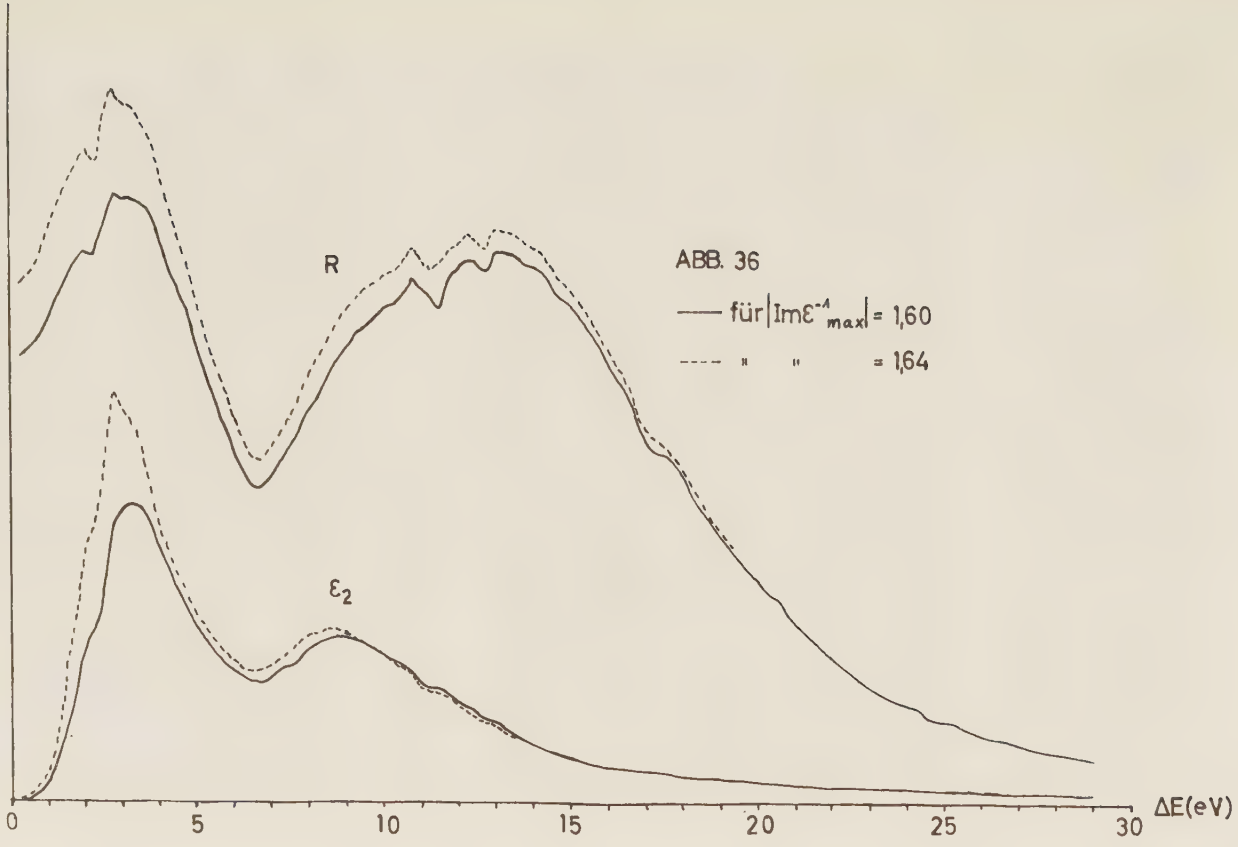


ABB. 35
Se q ∥ c
— |Im ε⁻¹|
---- ε₂
..... R
x 0.1
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)

nen abziehen, um die wahre Verlustintensität zu erhalten. Exakt gelingt dies aber nur im Gebiet kleiner verlustloser Intensitäten. Mit der Kenntnis von $Im\varepsilon^{-1}(0) = 0$, weil $\varepsilon_2(0) = 0$, muß nun mehr oder weniger willkürlich die Verlustintensität bis 0 eV interpoliert werden. Bei der Interpolation der Spektren von Selen war wenig Spielraum für Willkür, weil hier die Verlustintensität bis 1,5 eV gesichert ist. Mit den nach 0 eV inter- und nach 50 eV (siehe 4.3.2.1.) extrapolierten Verlustfunktionen wurden die in den Abbildungen 32, 33 und 34 dargestellten optischen Größen gewonnen.

Die Interpretation dieser Ergebnisse soll später erfolgen. Hier wollen wir nur den Zusammenhang zwischen Verlustfunktion und optischen Größen verdeutlichen und dabei besonders auf die Auswirkungen von Meßfehlern eingehen. Nur nach Klärung dieser Zusammenhänge kann man die optischen Größen realistisch interpretieren und vergleichen.

Es fällt auf, daß aus der relativ schwach strukturierten Verlustfunktion $Im\varepsilon^{-1}$ optische Größen entstehen, die zum Teil sehr ausgeprägte Strukturen besitzen. Besonders die Reflektivität reagiert auf kleinste Strukturen der Verlustfunktion heftig, wie es in Abb. 35 am Beispiel von Selen, $\underline{q} \parallel \underline{c}$ nochmal verdeutlicht ist. Bei jeder positiven Anstiegsänderung der Verlustfunktion entsteht ein Maximum in der Reflektivität (unter 20 eV). Selbst Schwankungen der Verlustfunktion, die sich aus der Digitalisierung mit ihren endlichen Stufen ergeben und die in der graphischen Darstellung und auch auf den Meßkurven nicht wahrnehmbar sind, erzeugen bei 9,5 eV eine scheinbare kleine Struktur der Reflektivität. Das bedeutet, daß kleine Maxima von R in Form und Lage mit Zurückhaltung zu betrachten sind. Wesentlich weniger empfindlich reagiert ε_2 auf Strukturen der Verlustfunktion (Abb. 35).


R
ε_2
ABB. 36
—— für $|Im\varepsilon^{-1}_{max}| = 1{,}60$
---- " " = 1,64
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)

Nur deutliche Änderungen der $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$-Werte verursachen hier Strukturen von ε_2. Man kann also die Struktur von ε_2 unkritischer zur Diskussion verwenden. Auf Strukturen der Verlustfunktion bei hohen Energien reagiert ε_2 sogar so unempfindlich, daß wir, wo nötig, ε_2 in diesem Bereich vergrößert wiedergeben.

Bisher wurden nur Struktureinflüsse der Verlustfunktion auf das Aussehen der optischen Funktionen besprochen. Ebenso hat auch die absolute Größe der Verlustfunktion einen Einfluß auf die optischen Größen, wie Abb. 36 verdeutlicht. Zum Test wurde hier die Verlustfunktion von Selen, $\underline{q} \perp \underline{c}$ um 2,5 % erhöht. R und ε_2 antworten mit einer zum Teil deutlich größeren Erhöhung und mit einer Verschiebung der Maxima zu kleineren Energien, wie besonders bei ε_2 zu erkennen ist. Bezieht man den im vorigen Abschnitt angegebenen maximalen Fehler von $\pm$ 15 % in die Überlegungen ein, so ist der Einfluß auf die optischen Konstanten schon sehr störend. Diese Tatsache wird bei anderen Autoren, deren Messungen mit ähnlichen Maximalfehlern behaftet sind, oft nicht erwähnt.

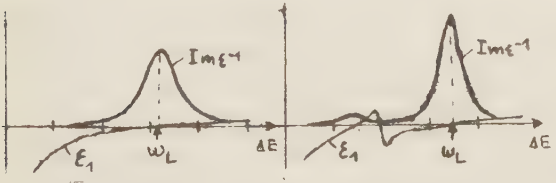
5.4. Erste Interpretation

Die Energieverlustfunktion von Selen wird wie bei allen Halbleitern von einem großen Maximum beherrscht. Es liegt nahe, dieses Maximum mit dem Volumenplasmon im Modell des freien Elektronengases in Verbindung zu bringen. Setzt man die sechs Valenzelektronen des Selens als freie Elektronen ein, so erhält man für die Lage des Plasmons:

$$\hbar\omega_p = (4\pi ne^2/m)^{1/2} = 17{,}4 \text{ eV}$$

n = Dichte der freien Elektronen, e und m = Ladung und Masse des Elektrons

Die Maxima der realen Verlustfunktion liegen gegen diesen Wert um ca 15 % verschoben bei 19,2 ($\underline{q} \parallel \underline{c}$) und 20,3 eV ($\underline{q} \perp \underline{c}$). Will man das Modell weiterstrapazieren, so kann man sagen, daß niederenergetische Einzelanregungen die Lage des Plasmons verschieben. Oder: Der für ein Plasmon typische Verlauf der komplexen DK (Abb. 37, a) wird durch das Auftreten von Oszillator-



$\hbar\omega_p$ = 16 eV
$\hbar\omega_0$ = 10 eV
Bei ω_L ist $\varepsilon_1 = 0$ u. Imε^{-1} maximal

Abb. 37 a b

strukturen zu höheren Energien (Abb. 37, b) verschoben. Beim genaueren Betrachten des realen DK-Verlaufs von Selen zeigt es sich, daß diese Erklärung im Detail nicht stimmt. ε_1 hat seinen Nulldurchgang nicht beim Maximum der Verlustfunktion, sondern bei der Energie $\hbar\omega_p$. Der Verlauf von ε_1 in diesem Gebiet entspricht also dem Modell des freien Elektronengases ohne Oszillatorverschiebung, aber der Verlauf von ε_2 läßt ein verschobenes Maximum der Verlustfunktion entstehen.

Energieverlustspektren von Selen wurden bisher von zwei Autoren aufgenommen. In beiden Fällen war das Selen nicht einkristallin. Für die Lage des Hauptmaximums fand Friedmann [22](Abb. 38) an amorphem und polykri-

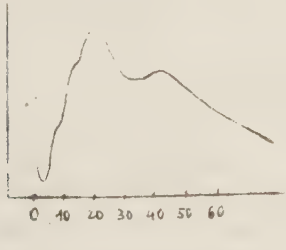


Abb. 38: CEV-Friedmann

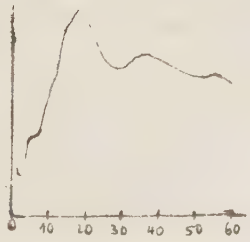


Abb. 39: CEV-Robins

stallinem Selen in Transmission Werte zwischen 19,7 und 23,3 eV, Robins [23](Abb. 39) gibt den in Reflexion gemessenen Wert von 18,8 eV für vermutlich amorphes Selen an. Angesichts der Tatsache, daß der Zusammenhang von Reflexionsspektrum und Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ undurchsichtig ist (Oberflächenanregungen, Winkelfaltung), stimmen die Ergebnisse gut mit unseren überein.

Die zweite noch starke Struktur in der Verlustfunktion liegt bei 6 eV als Maximum oder Schulter. Grob gesehen ist die Verlustfunktion in zwei Maxima bei 6 eV und bei 20 eV aufgeteilt. Diese Zweiteilung findet sich im Verlauf von ε_2 wieder (Abb. 33), das die Wahrscheinlichkeit von optischen Einzelanregungen beschreibt. Hier erkennt man das andere grobe Modell zur Beschreibung der Verlustfunktion. Beim Oszillatormodell (Abb.40) besitzt ε_1 zwei Nulldurchgänge. Bei $\hbar\omega_0$ können nur transversale Schwingungen der Elektronen angeregt werden, hier ist die optische Einzelanregung, charakterisiert durch ε_2, maximal. Bei $\hbar\omega_L$ können nur longitudinale Dichteschwingungen der Elektronen angeregt werden, hier ist die CEV-Anregung, charakterisiert durch $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$, maximal. Hinter jedem ε_2-Maximum liegt also mehr oder weniger direkt ein CEV-Maximum. Hier werden CEV-Maxima nicht in ein Volumenplasmon und andere Volumenanregungen aufgeteilt, sondern alle Maxima sind longitudinale Schwingungsmoden, die man jeweils optischen Einzelanregungen zuordnen kann. Bei der Zuordnung fällt auf, daß bis auf die Lage der beiden besprochenen Hauptmaxima, die Lage der ε_2- und der $\mathrm{Im}\,\varepsilon_1$-Strukturen ziemlich übereinstimmt. Im Oszillatorbild ist dies auch verständlich, weil nur bei starken

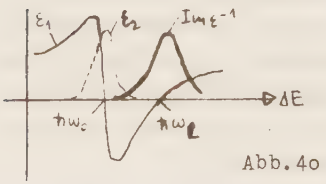


Abb.4o

Oszillatoren $\hbar\omega_0$ und $\hbar\omega_L$ weiter auseinanderliegen.

Um den spektralen Verlauf von ε_2 mit elektronischen Übergängen zu identifizieren, müssen wir die Energiebandstruktur von Selen kennen. Das Vorhandensein einer Energielücke in der Bandstruktur läßt sich allerdings schon ohne weitere Kenntnisse an den kleineren ε_2-Werten um 0 eV erkennen. Die Größe der Energielücke von 2 eV erkennt man nur an einer schwachen Schulter von ε_2 bei $\underline{q} \perp \underline{c}$. Der Anstieg von ε_2 in diesem Gebiet ist sicher nicht realistisch, weil die Energieverlustfunktion hier nicht genau genug bekannt ist und weil die Kramers-Kronig-Analyse hier mit zu geringer Energieauflösung gerechnet wurde.

Die Zweiteilung der ε_2-Spektren in einen Bereich von 0 - 6 eV und einen Bereich über 6 eV weist darauf hin, daß wahrscheinlich ab 6 eV neue Bänder zur Größe von ε_2 beitragen.

5.5. Vergleich mit anderen Ergebnissen

CEV-Messungen an einkristallinem Selen liegen nicht vor. Seit es die Möglichkeit gibt, relativ große Seleneinkristalle herzustellen [24, 25], wurden zahlreiche optische Reflexionsmessungen an kompakten Seleneinkristallen durchgeführt [26, 27, 28, 20, 21, 29, 2]. Wir möchten zum Vergleich nur Arbeiten heranziehen, in denen ε_2 über einen größeren Energiebereich berechnet wurde. Denn nur ε_2 läßt exakte Vergleiche mit der Energiebandstruktur zu. Von Tutihasi und Chen [20] wurden 1967 Reflexionsmessungen im Energiebereich 0 bis 5 eV durchgeführt. Dabei wurde die Reflektivität bei beinahe senkrechter Einfalls-

Abb.41

richtung an einer (10$\bar{1}$0)-Kristallfläche mit linear polarisiertem Licht gemessen, wobei der elektrische Feldvektor $\underline{E} \parallel \underline{c}$ oder $\perp \underline{c}$ lag (Abb.41). Da die Anwendung der Kramers-Kronig-Analyse zur Berechnung der optischen Konstanten die Kenntnis von Reflexionswerten bis zu möglichst hohen Energien verlangt, wurde die Reflektivität zwischen 5 eV und 10 eV mit einer unpolarisierten Lichtquelle gemessen und zur Extrapolation der Reflektivitätskurven für beide Richtungen verwendet.

Leiga [21] erweiterte 1967 den Energiebereich durch Messungen zwischen 4 eV und 14 eV. Dabei verzichtete er auf eine polarisierte Lichtquelle und maß statt dessen an zwei verschiedenen Kristallflächen (10$\bar{1}$0) und (0001) die pauschale Reflektivität (Abb. 42).

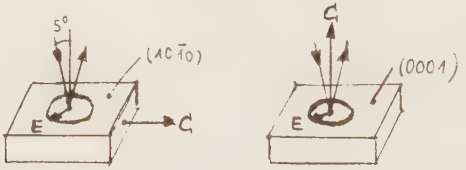


Abb.42

Gemessen wird: $R = (R_{\underline{E} \parallel \underline{c}} + R_{\underline{E} \perp \underline{c}})/2$ $\qquad R = R_{\underline{E} \perp \underline{c}}$

Daraus konnte Leiga $R_{\underline{E} \parallel \underline{c}}$ und $R_{\underline{E} \perp \underline{c}}$ berechnen. Die absoluten Reflektivitätswerte stimmten im Überlappungsgebiet zwischen 4 und 5 eV mit Tutihasis Werten nicht überein. Deshalb wurden die gesamten Reflektivitätskurven an die von Tutihasi angepaßt. Um wieder für die Kramers-Kronig-Analyse den Energiebereich zu erweitern, wurden bei 16,8 eV und 21,2 eV (Neon- und Heliumlinie) zusätzlich die Reflektivität gemessen.

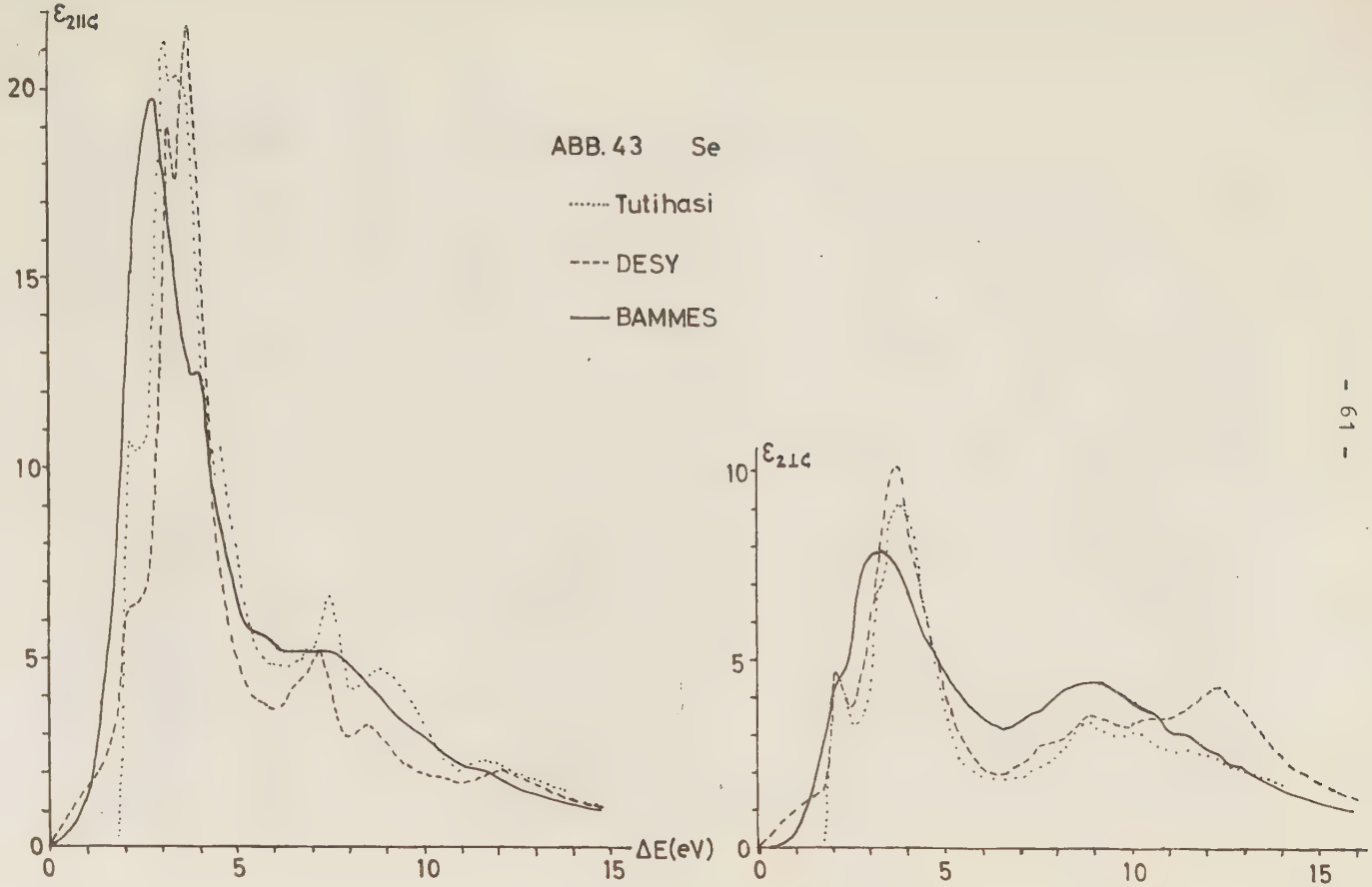


ABB. 43 Se

..... Tutihasi

---- DESY

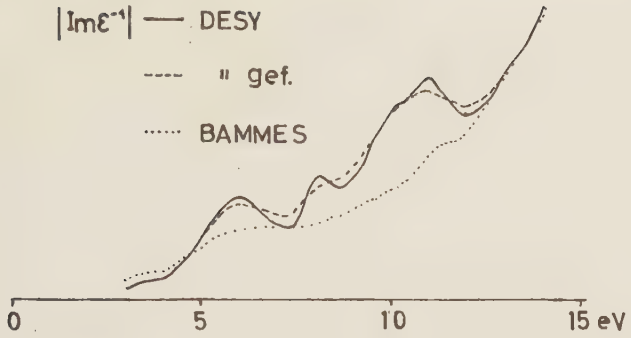
—— BAMMES

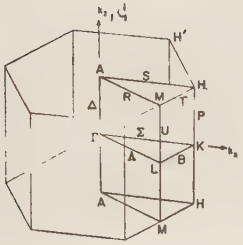
Von Klucker, Koch und Tuomi [2] wurden 1971 am Deutschen Elektronen Synchrotron (DESY) mit Hilfe der linear polarisierten Synchrotronstrahlung erstmals zusammenhängend zwischen 3 und 30 eV die Reflektivität an einer $(10\bar{1}0)$-Kristallfläche für $\underline{E} \parallel \underline{c}$ und $\underline{E} \perp \underline{c}$ gemessen (Meßprinzip wie in Abb.41). Weil die Reflektivität nicht absolut bestimmt werden konnte, wurden die Reflektivitätskurven an Werte von Tutihasi und Leiga zwischen 3,5 eV und 6 eV angepaßt.

Zum Vergleich der optischen Meßergebnisse mit den unseren sind für die Fälle $\underline{E}$ bezw. $\underline{q} \parallel \underline{c}$ und $\perp \underline{c}$ die ε_2-Kurven der soeben ausführlicher besprochenen Arbeiten in Abb.43 übereinandergezeichnet.

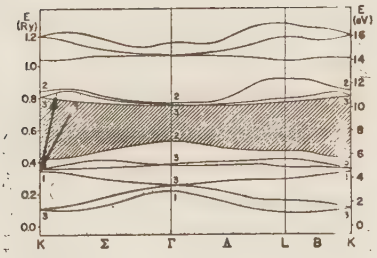
Für $\underline{E}$ bezw. $\underline{q} \perp \underline{c}$ stimmen die Ergebnisse aller vier Messungen von 0 bis 10 eV recht gut überein. Die Strukturen bei 2 eV, 3,5 eV, 7,5 eV und 8,8 eV werden von allen 3 Spektren wiedergegeben. Bemerkenswert sind auch die geringen Diskrepanzen in den Absolutwerten. Auch ist die Übereinstimmung im ersten Maximum um 4 eV erstaunlich, wenn man bedenkt, welche Fehler die Verlustfunktion im ersten Anstieg von 0 bis 4 eV aufweisen könnte. Ab 10 eV zeigen nur noch die Spektren von Leiga und unserer Arbeit gute Übereinstimmung. Es treten bei 10 eV und 11,5 eV hier zwei weitere gemeinsame Strukturen auf. Die ε_2-Werte der DESY-Gruppe steigen dagegen noch einmal zu einem ausgeprägten Maximum bei 12,3 eV an. Das hat zur Folge, daß hier in den Messungen der DESY-Gruppe Selen noch stark anisotrop wirkt, bei den anderen zwei Messungen dagegen nur schwach anisotrop. Die CEV-Messung hat hier wohl die Diskrepanz der beiden optischen Messungen klären helfen. Gerade im (für uns) hochenergetischen Gebiet können Oberflächenstrukturen, wie sie zum Beispiel beim Spalten entstehen, bei Reflektivitätsmessungen leicht Anisotropien vortäuschen.

ABB. 44

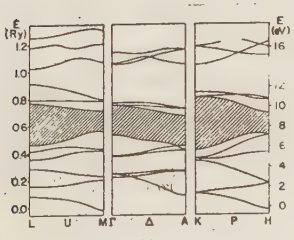




Brillouinzone



Übergänge mit q =0,09 und q =0,22 A^{-1}



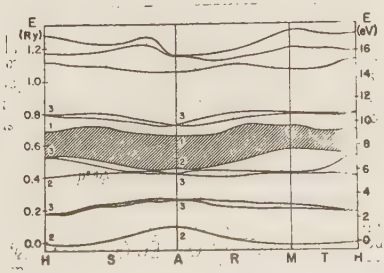


Abb. 45

Für $\underline{E}$ bezw. $\underline{q} \parallel \underline{c}$ schließen die ε_2-Kurven von Tutihasi und Leiga bei 4,5 eV trotz Reflektivitätsanpassung nicht aneinander an, weil bei der Kramers-Kronig-Analyse verschiedene Extrapolationen gemacht wurden. Sonst aber zeigen die optischen Kurven einen recht ähnlichen Verlauf. Auch die CEV-Kurven weichen im groben Verlauf nur wenig von den optischen Daten ab, auch was die Absolutwerte betrifft. Dagegen tauchen einzelne Strukturen der optischen ε_2-Kurven in den CEV- ε_2-Kurven verschmiert oder gar nicht auf, vor allem zwischen 6 und 10 eV. Diese Verschmierung legt nahe, den Einfluß der experimentellen Energieauflösung auf unsere Messungen nochmal kritisch zu untersuchen. Dazu falten wir zwischen 5 eV und 14 eV die Im ε^{-1}-Kurven, welche die DESY-Gruppe aus ihren Meßwerten berechnet hat, mit unserer Energieverteilungsfunktion (Halbwertsbreite 1 eV). Vergleicht man das Ergebnis der Faltung mit unseren Messungen (Abb.44), so sieht man, daß man die optisch gemessenen Strukturen bei einer CEV-Messung durchaus hätte finden müssen und daß sie nicht mit unseren Ergebnissen vereinbar sind. Diese Unterschiede zwischen optischen und CEV-Messungen erklären wir damit, daß bei unseren Messungen im Gegensatz zu optischen nicht senkrechte Interbandübergänge stattfinden. Dies besprechen wir genauer in 5.7.

Wir führen den Vergleich nur bis 14 eV durch, weil Leiga nur bis 14 eV gemessen hat, und weil die Reflektivitätsmessungen zumindest hier bei höheren Energien auf ε_2-Strukturen schwächer reagieren als CEV-Messungen. Die letzte R-Struktur der DESY-Gruppe ist eine Schulter um 16 eV. Deren Energielage ist im ε_2-Spektrum nicht bekannt. Der allgemeine Verlauf der optischen Konstanten wird im Gebiet des Hauptmaximums von den CEV-Messungen wesentlich genauer wiedergegeben.

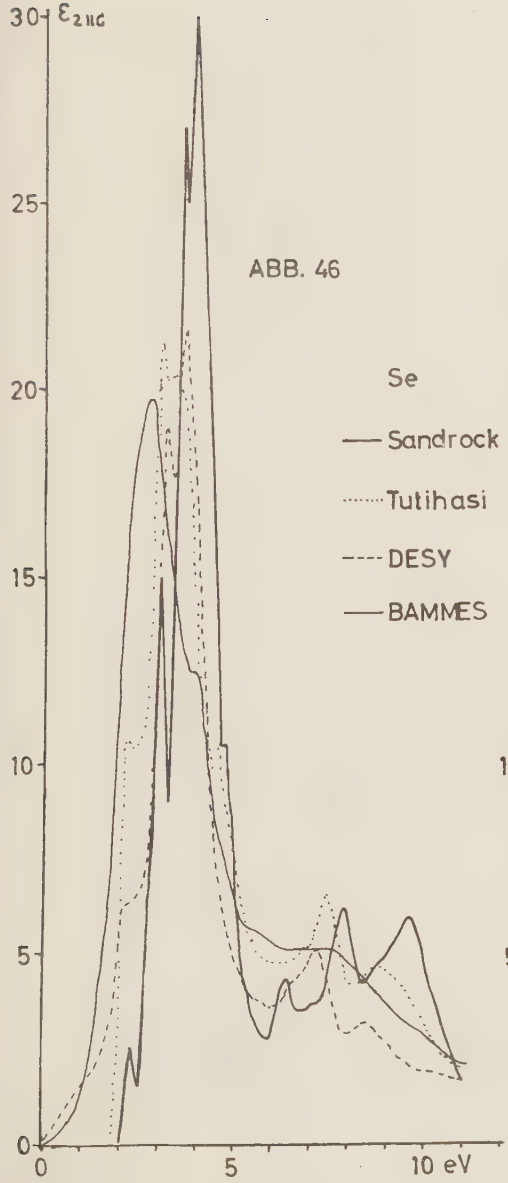


ABB. 46

Se

—— Sandrock

····· Tutihasi

---- DESY

—— BAMMES

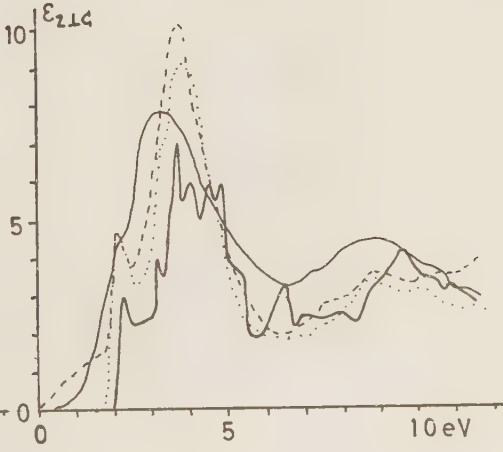


ABB. 47

5.6. Weitere Interpretation

Wir möchten hier zuerst die ε_2-Strukturen mit Elektronenübergängen im Energiebandschema identifizieren. Dazu benützen wir Ergebnisse von Sandrock [30, 31]. Er berechnete mit Hilfe eines Pseudopotentials die Bandstruktur (Abb.45) und das ε_2-Spektrum bis 12 eV*). Vorausgehende Rechnungen anderer Autoren waren weniger ausführlich [32, 33, 34, 35, 36, 37] oder zeigten Ergebnisse, wie z.B. Rechnungen mit der weniger empirischen sog. KKR-Methode [35, 37] , die keine quantitativen Vergleiche erlaubten. Die Rechnungen von Sandrock machten deutlich, daß die Lage und Anisotropie von Maxima nicht allein von den Bandabständen und Auswahlregeln an symmetrischen Punkten abhängig ist. Vielmehr sorgt die geringe Krümmung der Bänder und vor allem ein stark von $\underline{k}$ abhängendes Matrixelement dafür, daß sich die meisten ε_2 -Strukturen nicht in der Brioullinzone lokalisieren lassen. Die Güte einer Theorie läßt sich also bei Selen nur durch den Vergleich vom theoretisch berechneten ε_2 mit dem experimentell ermittelten ε_2 feststellen. Dieser Vergleich wurde von Sandrock an Hand der Messungen von Tutihasi und Leiga ausführlich gemacht. Ohne Diskussion seien deshalb hier in Abb. 46 für den Fall $\parallel \underline{c}$ und in Abb. 47 für den Fall $\perp \underline{c}$ die Ergebnisse von Sandrock, Tutihasi, Leiga, DESY-Gruppe und uns zusammengestellt. Der Grad der Übereinstimmung gibt uns zumindest die Berechtigung, die experimentellen Maxima wie Sandrock in das Energiebandschema einzuordnen, ohne dabei auf die genaue Energielage zu achten.

---

*) Exzitonenübergänge, die bei kleinen Energien (<3 eV) schon beobachtet wurden, sind in diesen Rechnungen natürlich nicht enthalten.

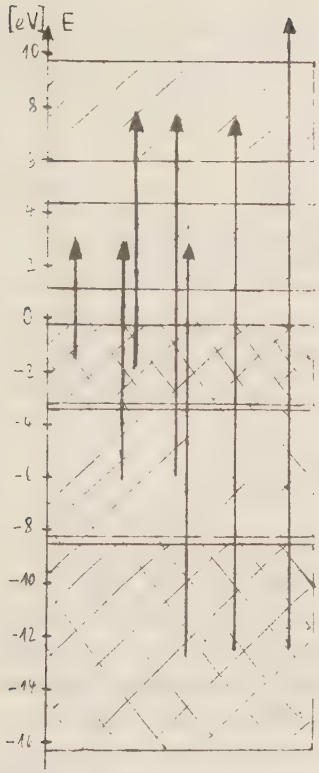


Abb. 48

In Abb. 48 haben wir dazu in einem k-unabhängigen Bandschema Bandtriplets zu einem Band zusammengefaßt. Sie sind mit Valenz- oder Leitungsbandtriplet (VBT oder LBT) bezeichnet. Die Strukturen zwischen 2 und 5 eV entstehen durch Übergänge vom VBT1 zum LBT1. Ab 6eV werden diese Übergänge durch Übergänge vom VBT2 zum LBT1 und vom VBT1 zum LBT2 abgelöst. Diese Übergänge äußern sich in den neuen Strukturen bis 10eV. Nach 10 eV sollten zusätzlich Übergänge vom VBT2 zum LBT2 und vom VBT3 zum LBT1 auftreten. Damit könnte die kleine Schulter bei 11,5 eV erklärt werden, die für beide Richtungen auftaucht. Die noch kleineren ε_2-Strukturen um 17 eV könnten von dem Übergang VBT3 nach LBT2 stammen, der ab 16 eV einsetzen kann. Auch die kleinen Maxima bei 25 eV kann man diesen Bändertriplets zuordnen. Dagegen läßt sich die Struktur bei 28 eV ($\perp$ c) nicht mehr in die Energieniveaus von Sandrock einordnen. Noch tiefer liegende Valenzbänder gibt es nicht, und die nächsten Energieniveaus sind 3d-Rumpfniveaus bei ca. 55 eV. Wir nehmen deshalb an, daß hier Übergänge in noch höhere Leitungsbänder stattfinden als von Sandrock berechnet. Die Existenz solch höherer Leitungsbänder müßte eigentlich bei allen Übergängen mit mehr als 11 eV Energiedifferenz berücksichtigt werden. Hier sollte noch gesagt werden, daß

es durchaus sinnvoll ist, solche kleine ε_2-Strukturen bei höheren Energien noch zu diskutieren. Denn die Wahrscheinlichkeit für Elektronenübergänge W ($\hbar\omega$), die wirklich interessierende Größe, wird von ε_2 wegen der Beziehung

$$W(\hbar\omega) \propto \frac{\varepsilon_2}{\omega^2}$$

bei höheren Energien nur sehr unempfindlich wiedergegeben. Hier erweist sich also die CEV-Messung als sehr empfindliche Nachweismethode, weil diese hochenergetischen Strukturen im $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ relativ deutlich wiedergegeben werden.

5.7. Nichtsenkrechte Interbandübergänge.

Die optischen Konstanten hängen nicht nur von $\hbar\omega$, sondern auch vom Impulsübertrag $\hbar\underline{q}$ ab. Bis jetzt haben wir, wie es in der Optik gewöhnlich erlaubt ist, nur die Richtung von $\underline{q}$, nicht aber den Betrag berücksichtigt. Der endliche Betrag von $\hbar\,\underline{q}$ bewirkt, daß ε_2 nur aus Beiträgen von nichtsenkrechten Interbandübergängen gebildet wird. Abweichungen zum optisch ermittelten ε_2 treten auf, wenn die Grösse von $\hbar\underline{q}$ gegenüber der Ausdehnung der Brillouinzone (BZ) nicht zu vernachlässigen ist. Dazu ein paar Zahlen für unser Experiment:

Impulsüberträge: $|\underline{q}| = 0{,}09\ \text{Å}^{-1}$ für $\vartheta = 1\cdot10^{-3}$ rad

$|\underline{q}| = 0{,}22\ \text{Å}^{-1}$ für $\vartheta = 2{,}4\cdot10^{-3}$ rad

Rand der BZ: $|k_{BZ}| = 0{,}63\ \text{Å}^{-1}$ in Richtung auf A

$|k_{BZ}| = 0{,}83\ \text{Å}^{-1}$ in Richtung auf L

Schon beim Streuwinkel $\vartheta = 1\cdot10^{-3}$ rad ist also die Größe von $\underline{q}$ 14 % des Abstandes $\overline{\Gamma A}$.

Wir stark ε_2 von $\underline{q}$ abhängt, wird von zwei Faktoren bestimmt. Mit der Änderung von $|\underline{q}|$ wird erstens die kombinierte Zustandsdichte geändert. Hier wird die Änderung stark sein, wenn sich die Energie der Bänder stark mit $\underline{k}$ ändert. Betrachtet man die als Beispiel in Abb. 45 eingezeichneten Übergänge für $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad und $\vartheta = 2{,}4 \cdot 10^{-3}$ rad, so kann man eigentlich nur für den größeren Streuwinkel Änderungen gegenüber dem senkrechten Übergang mit $\underline{q} = 0$ erwarten, weil die Bänder relativ flach sind. Außer den Bandabständen wird aber auch das sog. Matrixelement oder die Interbandoszillatorstärke mit der Vergrößerung von $|\underline{q}|$ geändert. Das Matrixelement kann in der Form [4]

$$\underline{e} \cdot \underline{M}_{v,l} = \int_V d^3\underline{r}\, e^{i(\underline{k}-\underline{q})\cdot\underline{r}}\, u_c^* \cdot \underline{e} \cdot \nabla e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} u_v$$

mit v = Valenzband u = Blochfunktionen
l = Leitungsband k = Wellenvektoren

geschrieben werden. Sandrock hat für den Fall $\underline{q} = 0$ das Matrixelement für 576 Punkte der Brillouinzone ausgerechnet und für ein paar Übergänge auch angegeben. In den angegebenen Werten ändert sich das Matrixelement bei der benützten Schrittweite von $k_{BZ}/6$ längs einer Gerade durch die BZ oft mehrfach und drastisch. Man kann deshalb erwarten, daß das Matrixelement sich bei festem $\underline{k}$ stark mit $|\underline{q}|$ ändern kann.

Zeppenfeld [38] beobachtete erstmals bei Graphit Abweichungen von optischen Ergebnissen, weil er mit nichtsenkrechten Übergängen veränderte kombinierte Zustandsdichten erhielt. Er bekam schon Änderungen von ε_2 bei $\underline{q}$ - Beträgen, deren Größe etwa 10 % der Ausdehnung der Brillouinzone war, weil die Bandstruktur von Graphit stark $\underline{k}$-abhängig war. Das Matrixelement setzte er k-unabhängig an. Wir beobachten eine solche Änderung des Verlustspek-

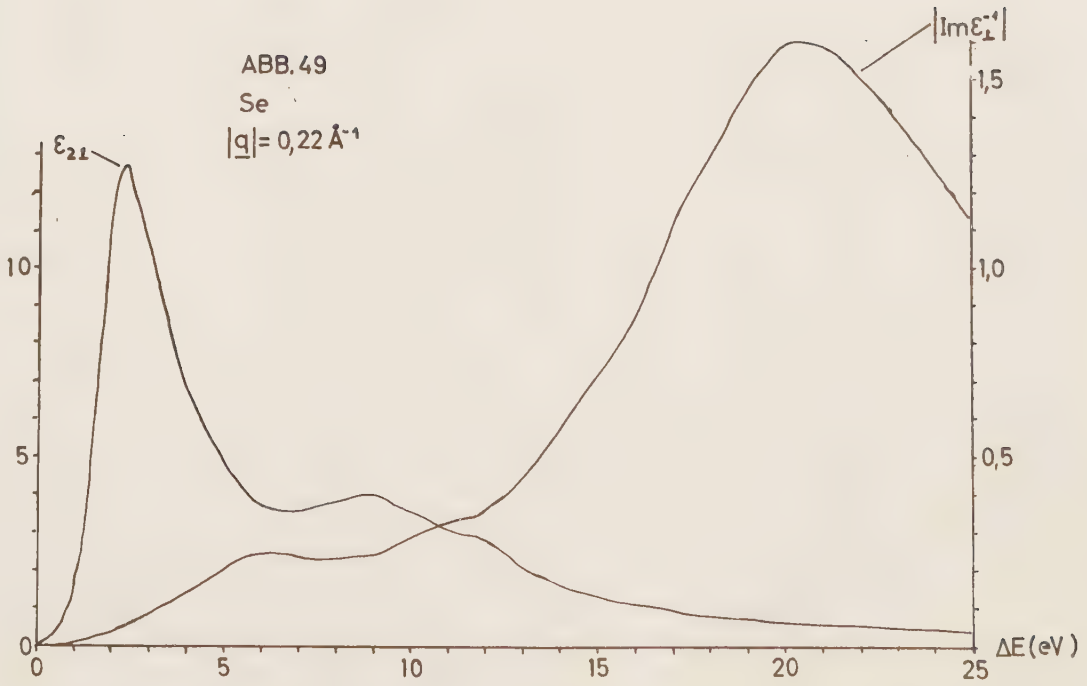


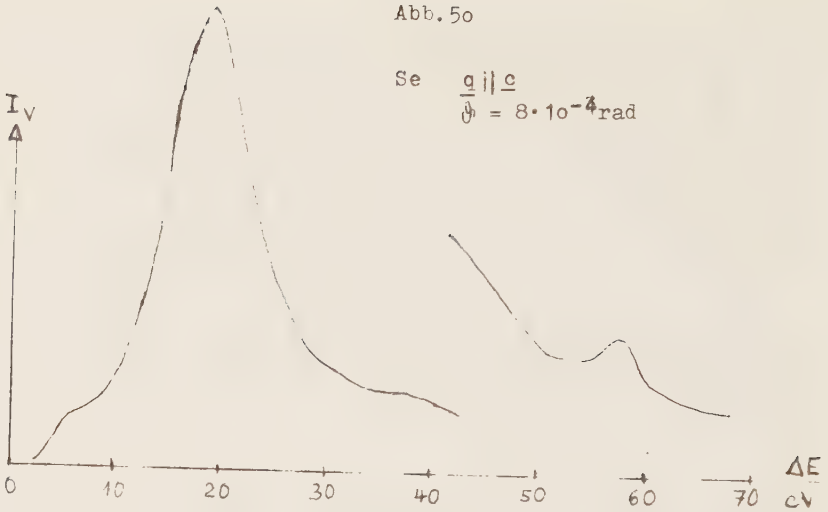
ABB. 49
Se
|q| = 0,22 Å⁻¹
ε₂₁
|Im ε₁⁻¹|
10
5
0
1,5
1,0
0,5
0
5
10
15
20
25
ΔE (eV)

trums beim Streuwinkel $\vartheta = 2{,}4 \cdot 10^{-3}$ rad für $\underline{q} \perp \underline{c}$ *) (Abb.49). Die Änderung besteht in einer Ausschmierung der Struktur bei 6 eV. (Die kleineren Strukturen konnten wegen der geringen Verlustintensität nicht mehr aufgelöst werden). Eine Interpretation im Energiebandschema wird nicht versucht, weil schon für $\underline{q} = 0$ sich die einzelnen ε_2-Strukturen im Bandschema nicht lokalisieren lassen. Es wäre interessant, mit Sandrocks Daten ε_2 für dieses $\underline{q} = 0{,}22$ Å^{-1} zu berechnen. Die Änderung des Verlustspektrums bei $2{,}4 \cdot 10^{-3}$ rad kann mit Änderungen der kombinierten Zustandsdichte oder des Matrixelementes erklärt werden.

Dagegen legt es der relativ kleine Wert $|\underline{q}| = 0{,}09$ Å^{-1} ($\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad) nahe, die Verschmierung der optischen Strukturen von ε_2 zwischen 6 und 10 eV bei $\underline{q} \parallel \underline{c}$ (5.5., Abb.43) mit Änderungen des Matrixelementes zu erklären. Eine sichere Entscheidung für die Richtigkeit dieser Deutung würde eine CEV-Messung bei kleinerem $|\underline{q}|$ bringen, aber leider ist es nicht sinnvoll, Energieverlustspektren für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ bei kleineren $|\underline{q}|$ (ϑ) aufzunehmen, weil hier die Richtung von $\underline{q}$ im Azimutwinkel φ zu unbestimmt ist (siehe 4.1. und 3.5.2.). Bei kleineren Streuwinkeln müßten dann die jetzt verschmierten Strukturen die schärferen optischen Formen annehmen. Nach Sandrock tragen zu den beiden optischen Maxima bei 7,4 eV und 8,6 eV die Übergänge VBT2 → LBT1 und VBT1 → LBT2 verschieden stark bei und rufen dadurch zwei Maxima hervor. Durch die Vergrößerung von $|\underline{q}|$ werden diese Beiträge vermutlich so geändert, daß eine breite Schulter bei 7,5 eV entsteht.

---

*) Die Angabe $\underline{q} \perp \underline{c}$ ist eigentlich nur für $|\underline{q}| \approx 0$ ausreichend. Denn nur dann ist $\varepsilon(\hbar\omega, \underline{q})$ für alle $\underline{q}$ mit $\underline{q} \perp \underline{c}$ gleich. In unserem Fall liegt $\underline{q}$ um 2° bis 12° außerhalb der Schicht.



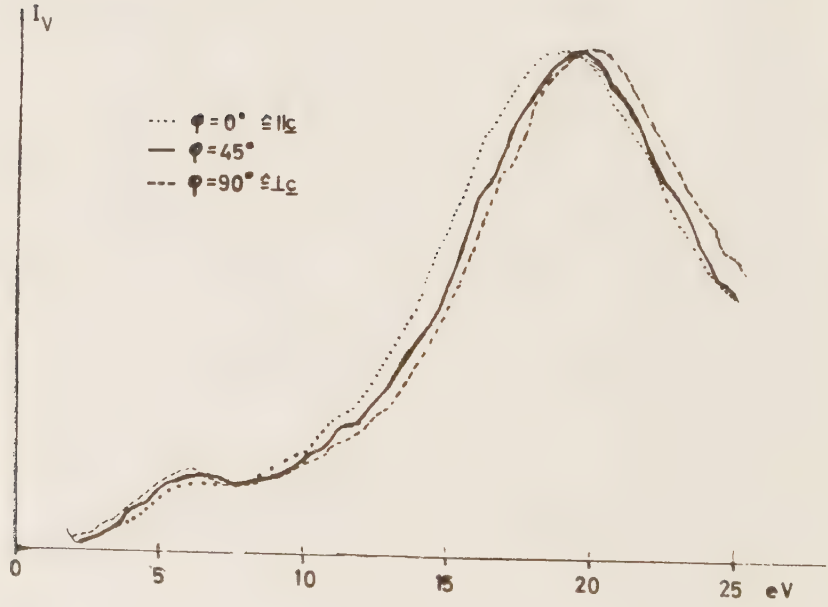


Abb. 52: Verlustspektren von Selen für 3 Richtungen. $= 1 \cdot 1o^{-3}$ rad.

Man sieht an den letzten Überlegungen, daß unsere CEV-Messungen wegen des endlichen $\underline{q}$-Betrages nur mit Vorbehalt mit optischen Messungen ($|\underline{q}| \approx 0$) zu vergleichen sind. Wir nahmen deshalb beim Vergleich (5.5.) an, daß unsere ε_2-Struktur noch nicht von $|\underline{q}|$ beeinflußt ist, wenn sie mit mindestens einer optischen ε_2-Struktur übereinstimmt.

Alle Abweichungen der CEV-Messungen von optischen Experimenten -soweit die Abweichungen vom unterschiedlichen $|\underline{q}|$ stammen- bieten dem Theoretiker zusätzliche Information, um seine Ansätze zur Aufklärung der elektronischen Struktur zu prüfen. Bei Messungen mit größeren $\underline{q}$-Beträgen, als von uns verwendet, wäre es lohnend, nicht nur die Richtungen $\underline{q} \parallel \underline{c}$ und $\underline{q} \perp \underline{c}$ zu untersuchen, sondern alle möglichen Richtungen, weil jede Richtung ein neues $\varepsilon_2(\hbar\omega, \underline{q})$ ergibt. Wir verzichteten auf solche Messungen wegen Intensitätsschwierigkeiten ($I_V \propto \frac{1}{q^2}$).

5.8. Spektren bis 70 eV

Zur Übersicht wurden auch Energieverlustspektren bis 70 eV aufgenommen. Wir möchten hier nur ein typisches Spektrum (Abb.50) zeigen. Deutlich erkennt man den doppelten Hauptverlust bei 38 eV. Bei 57 eV ist nochmal eine deutliche Struktur zu erkennen. Wir ordnen dieser Struktur 3d-Rumpfzustände zu, deren M IV - M $\overline{V}$-Kante bei 56,7 eV [39] beobachtet werden. Dieser Struktur ist eine Schulter, die schon bei 50 eV beginnt, aufgesetzt. Diese Schulter ist der dreifache Hauptverlust bei 56 eV.

5.9. Anisotrope Plasmonen

Die Tatsache, daß bei der CEV-Messung für $\underline{q}$-Richtungen zwischen $\| \underline{c}$ und $\perp \underline{c}$ die Anregungen von nicht rein longitudinalen Schwingungen (Coulomb-Excitonen) [40] beobachtet werden, führt bei Selen nicht zu auffallenden Effekten. Der Grund liegt in der geringen Anisotropie des Selens. Wir wollen dies am einfachen Oszillatormodell [41, 42] für schwache Anisotropie erläutern (Abb. 51). Für die zwei Richtungen $\| \underline{c}$ und $\perp \underline{c}$ sollen zwei starke Oszillatoren bei den verschiedenen Energien $\hbar\omega_{0\|}$ und $\hbar\omega_{0\perp}$ liegen. Für die Richtungen $\| \underline{c}$ oder $\perp \underline{c}$ werden bei den Energien $\hbar\omega_{L\|}$ oder $\hbar\omega_{L\perp}$ Verluste beobachtet. Dreht man die $\underline{q}$-Richtung von $\| \underline{c}$ nach $\perp \underline{c}$, so wird das Maximum bei $\hbar\omega_{L\|}$ unter eventueller Veränderung seiner Form zur Energie $\hbar\omega_{L\perp}$ wandern. Außerdem sollte für Zwischenrichtungen kurz ein Maximum zwischen $\hbar\omega_{0\|}$ und $\hbar\omega_{0\perp}$ auftauchen. Die Höhe dieses Maximums wird umso größer, je kleiner bei dieser Energie ε_2 ist. Bei Selen (Abb.32, 33) liegen nun die Oszillatoren so dicht beieinander oder sind so schwach, daß man wohl die Veränderungen von $\hbar\omega_{L\|}$ nach $\hbar\omega_{L\perp}$ beobachten kann (Abb. 52), aber keine neue Struktur zwischen $\hbar\omega_{0\|}$ und $\hbar\omega_{0\perp}$, was der interessante Aspekt in der Theorie der anisotropen Plasmonen ist. Das war wohl auch der Grund, diesem Verlust den eigenen Namen Anisotron zu geben [42, 43].

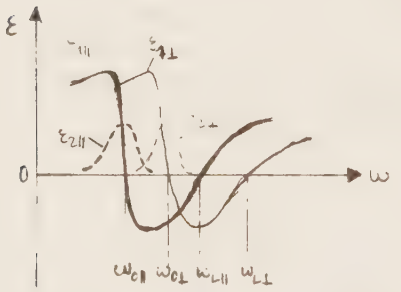


Abb. 51

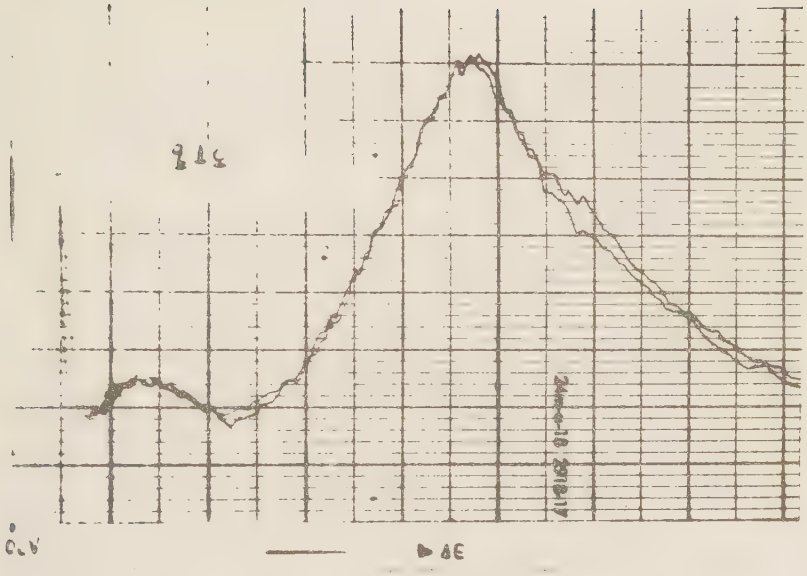


Abb. 53: Originalspektren von Tellur

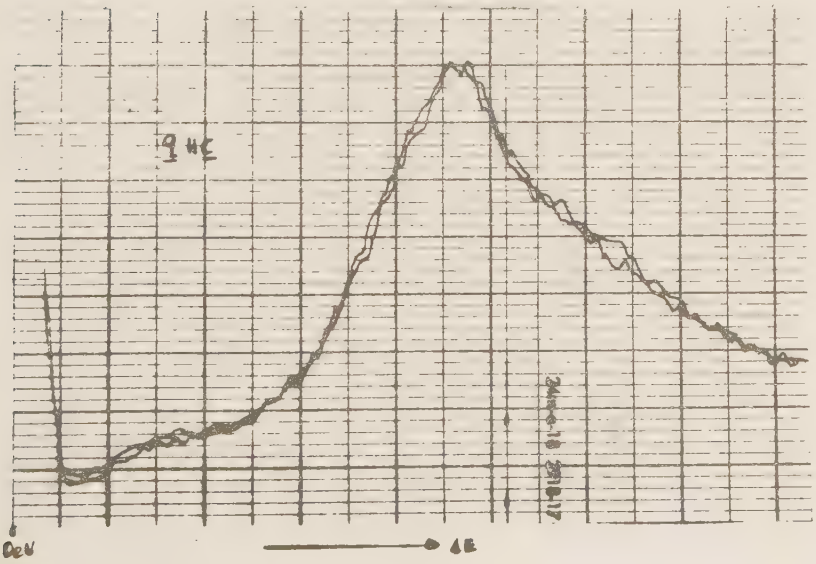


ABB. 54
Te
— q∥ c
---- q⊥ c
1,5
1,0
0,5
0
Im ε⁻¹
0
5
10
15
20
25
30
ΔE(eV)

6. Ergebnisse bei Tellur

Die Energieverlustmessungen wurden an 4 einkristallinen Tellurschichten vorgenommen. Die Schichten waren freitragend präpariert.

6.1. Im $\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ *) und $\underline{q} \perp \underline{c}$.

Wie bei Selen sollen auch hier zuerst Originalspektren gezeigt werden (Abb.53). Die Spektren wurden wieder bei einem Streuwinkel von $\vartheta = 1 \cdot 10^{-3}$ rad aufgenommen. Die apparativen Schwankungen im Spektrum sind etwas größer als bei Selen (5.1.), aber bei einer Wiederholung der Spektrenmessung lassen sich die echten Strukturen deutlich identifizieren. Nur in der hochenergetischen Flanke des Hauptmaximums gelingt das nicht. Durch Faltung der Originalspektren mit Energie- und Winkelverteilungsfunktionen erhielten wir den Verlauf der Verlustfunktion Im ε^{-1} (Abb.54).

Die Verlustfunktion zeigt im Gegensatz zu Selen nur bis 9 eV eine deutliche Anisotropie. Ebenso wie bei Selen wird die Verlustfunktion von einem Maximum beherrscht, dem ein kleines Maximum oder eine Schulter vorgelagert ist. Die energetischen Lagen dieser Hauptstrukturen sind gegenüber Selen etwas zu kleineren Energien verschoben (17,5 eV und 5 eV). Von den wesentlich kleineren Strukturen dürften für $\underline{q} \perp \underline{c}$ die Strukturen bei 10,4 eV, 12,1 eV, 13,9 eV und 15,5 eV, für $\underline{q} \parallel \underline{c}$ die Strukturen bei 8 eV, 10 eV, 10,6 eV und 11,5 eV gesichert sein. Im Gegensatz zu Selen waren bei Tellur die Hauptmaxima der Originalspektren für $\parallel \underline{c}$ und $\perp \underline{c}$ nicht gleich hoch. Das Maximum für $\underline{q} \perp \underline{c}$ war um den Faktor 1,19 höher als das Maximum für $\underline{q} \parallel \underline{c}$. Bei gleicher Apparaturjustierung zeig-

*) siehe S.43

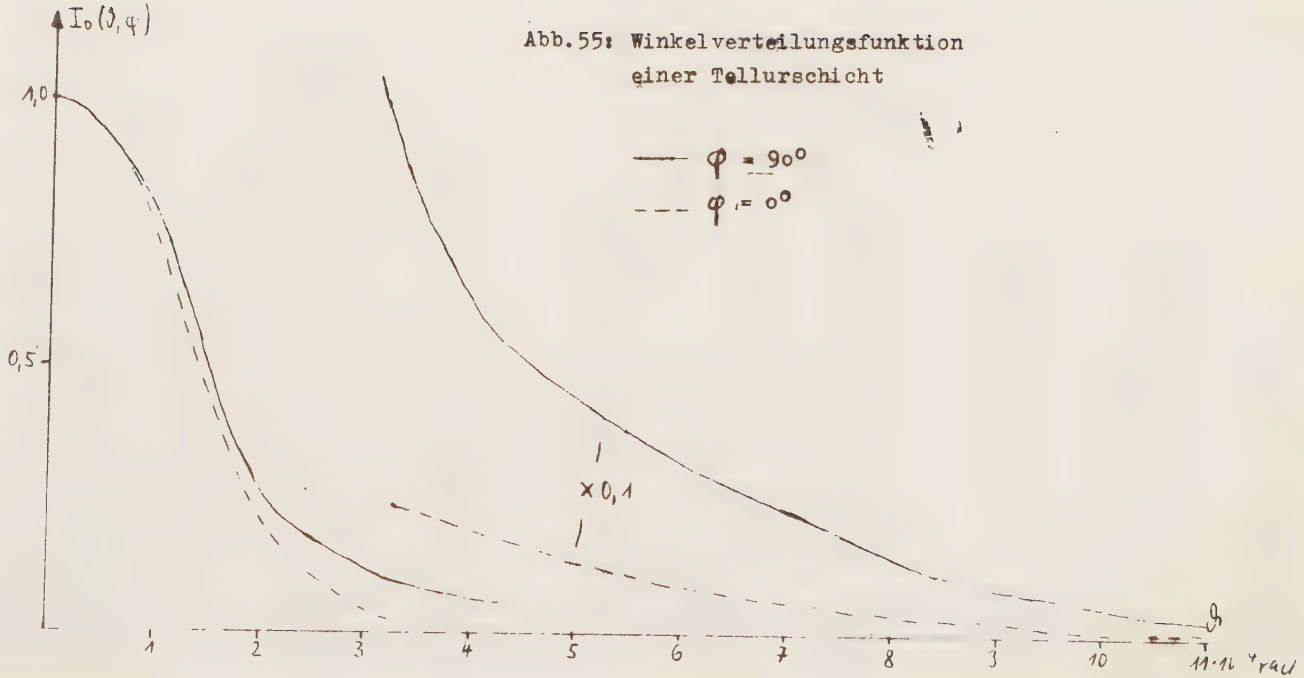


Abb. 55: Winkelverteilungsfunktion einer Tellurschicht

—— φ = 90°

--- φ = 0°

ten die Maxima von Aluminiumschichten ein Intensitätsverhältnis von 1,02 für dieselben zwei $\underline{q}$-Richtungen. Da beim isotropen Streuverhalten von Aluminium diese kleine Asymmetrie apparativ bedingt sein muß, wurde das Intensitätsverhältnis der Tellurmaxima mit dem der Al-Maxima auf den Wert 1,16 korrigiert [2].

Es stellte sich bei genaueren Rechnungen heraus, daß dieses Verfahren nicht korrekt war, weil bei unseren Tellurschichten die elastische Streuung stark anisotrop war. Bei Streuwinkeln um $1 \cdot 10^{-3}$ rad war die elastische Streuung bei Tellurschichten wesentlich stärker und anisotroper als bei Selenschichten (Abb.55). Dies führte dazu, daß für $\underline{q} \perp \underline{c}$ auch noch kleine, zusätzliche Verlustintensitäten von Elektronen gemessen wurden, die elastisch in den Winkel $1 \cdot 10^{-3}$ rad gestreut und dann unelastisch nur noch in kleinere Winkel abgelenkt wurden. Bisher wurden aber beinahe nur Elektronen berücksichtigt, die elastisch in kleine und unelastisch in den Winkel $1 \cdot 10^{-3}$ rad gestreut wurden. In Abb. 56 sei dieser Sachverhalt nochmal an Hand des Winkelfaltungsintegrals F (4.2.3.3.) erklärt. Der Integrand $I_o(\underline{\vartheta}') \cdot \left((\underline{\vartheta} - \underline{\vartheta}')^2 + \vartheta_E^2\right)^{-1}$ liefert zum Wert des Integrals hauptsächlich Beiträge für $\vartheta' \approx 0$. Für $\underline{q} \perp \underline{c}$ kommen dazu aber noch Beiträge aus Winkeln mit $\vartheta' \approx 1 \cdot 10^{-3}$ rad. Die unterschiedliche Größe des

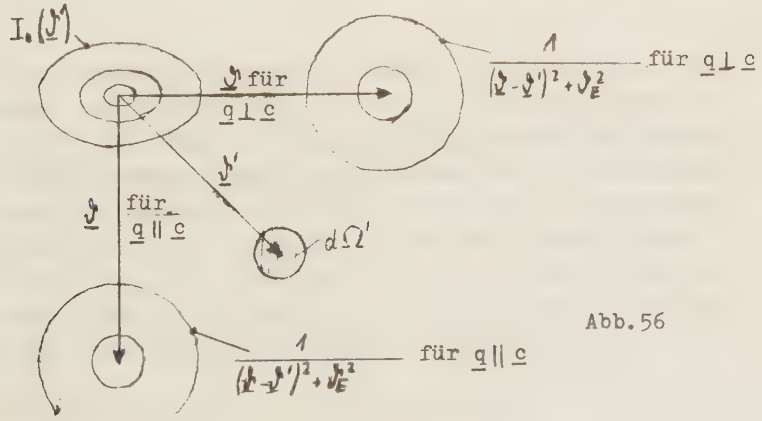


Abb.56

Winkelfaltungsintegrals F für $\perp \underline{c}$ und $\parallel \underline{c}$ führt dazu, daß die Verlustfunktion für beide Richtungen ungefähr gleich hohe Maxima besitzt.

An zwei Schichten wurden ähnliche zeitliche Intensitätsänderungen wie bei Selen (5.1.) beobachtet. Aus den gleichen Gründen wie bei Selen erklären wir diese Änderungen mit Erholvorgängen.

6.2. Absolutmessungen

Die Schichtdicke der Tellurschichten wurde nicht gemessen, nachdem sich bei Selen Schwierigkeiten ergeben hatten (5.2.). Bei der Benützung der Tolansky-Methode hätten die Tellurschichten, deren Dicke gemessen werden sollte, auf amorphes Selen statt auf einkristallines aufgedampft werden müssen. Diese Substratunterschiede sind also noch größer als bei Selen. Die optischen Konstanten wurden deshalb nach einer Anpassung der Verlustfunktion berechnet (6.3.).

6.3. Optische Konstanten

Um die optischen Konstanten berechnen zu können, mußte die Verlustfunktion $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$ bis 0 eV interpoliert werden. Wendet man das Verfahren an, das bei Selen (5.3.) beschrieben ist, so ergeben sich wegen der sehr hohen Primärlinie (elastisches Maximum) und wegen der hohen Verlustintensitäten bei kleinen Energien große Unsicherheiten in der Interpolation zwischen 3 und 0 eV. Alle optischen Strukturen, die in diesem Interpolationsbereich berechnet wurden, sind mit entsprechender Vorsicht

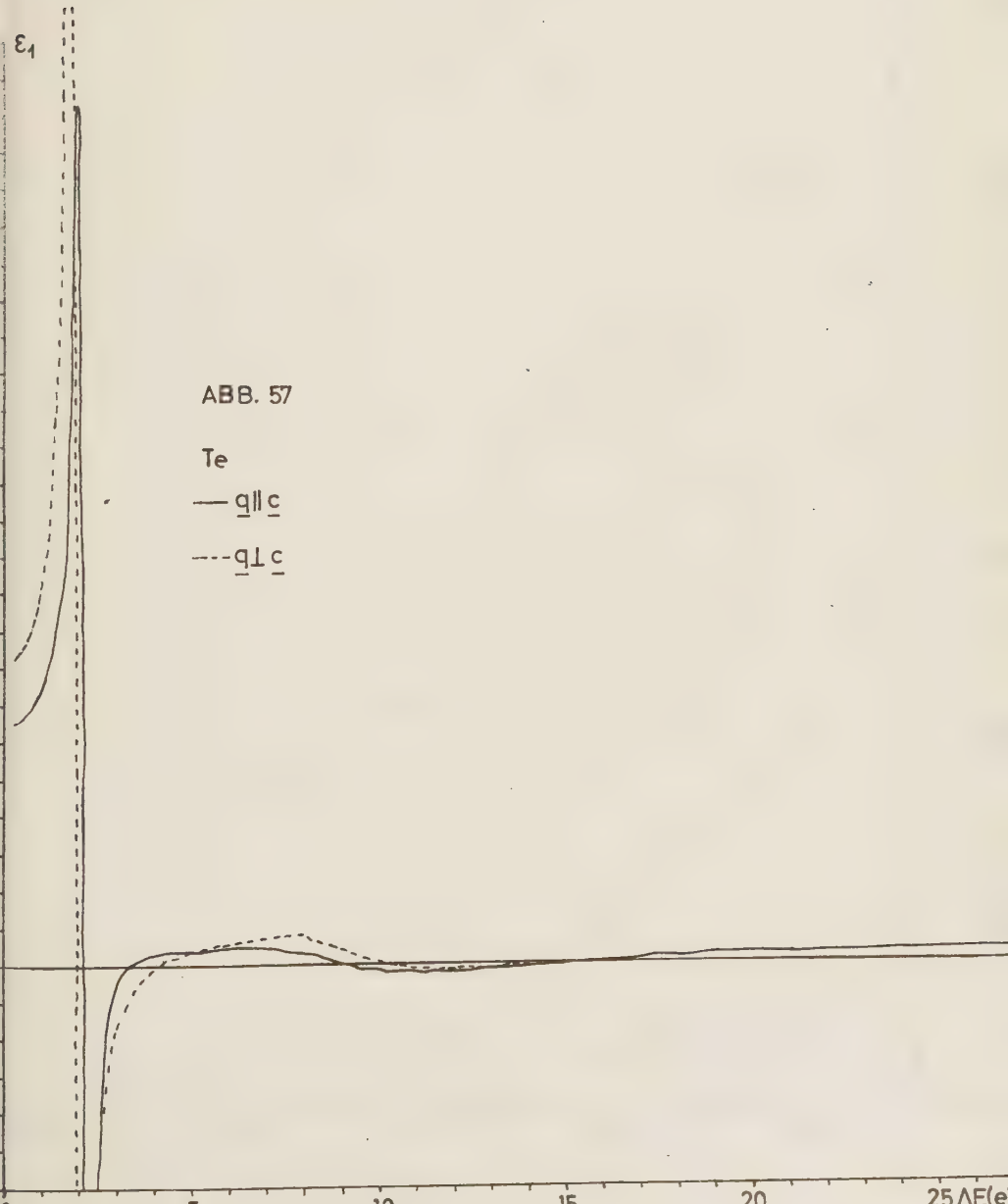
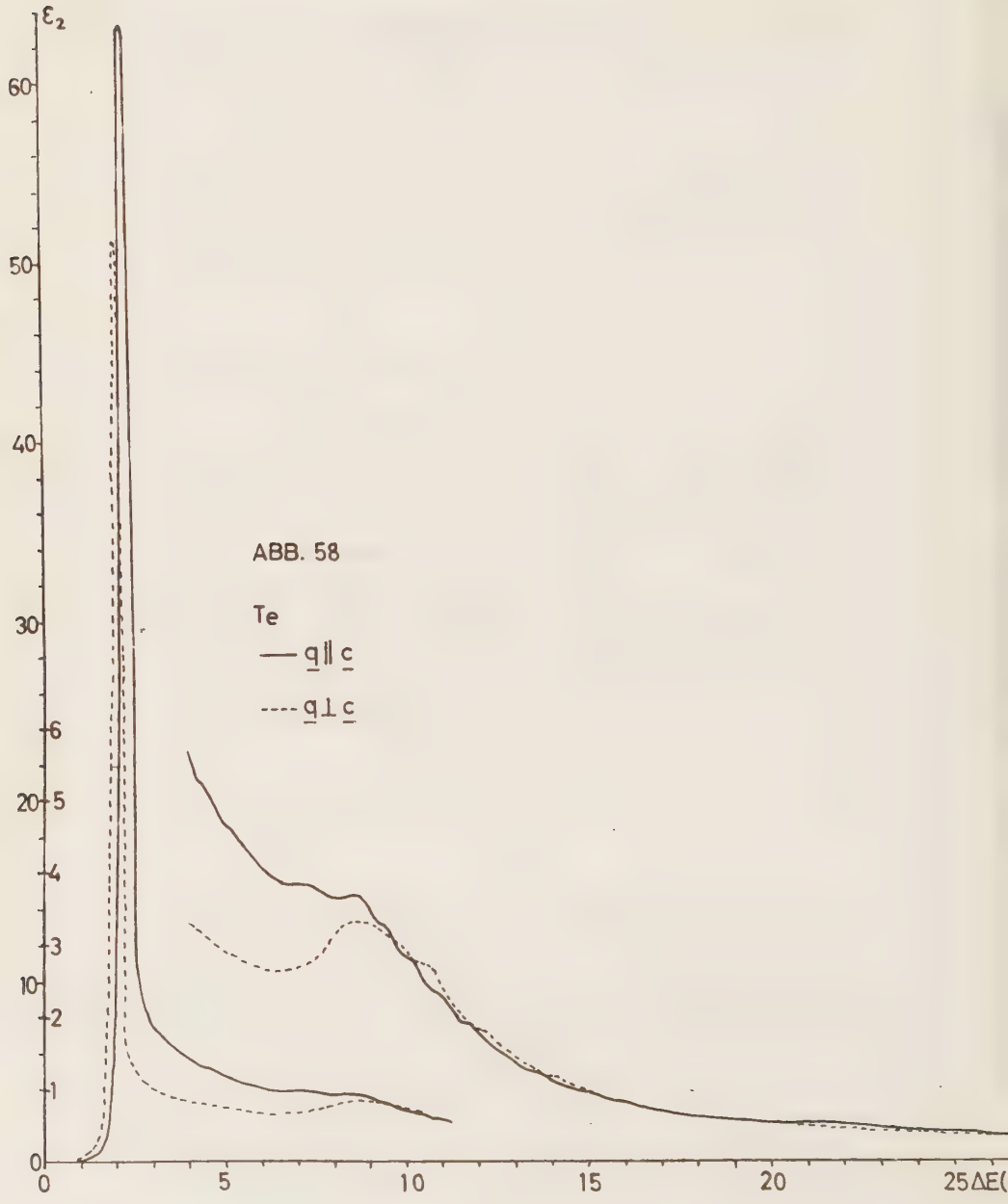


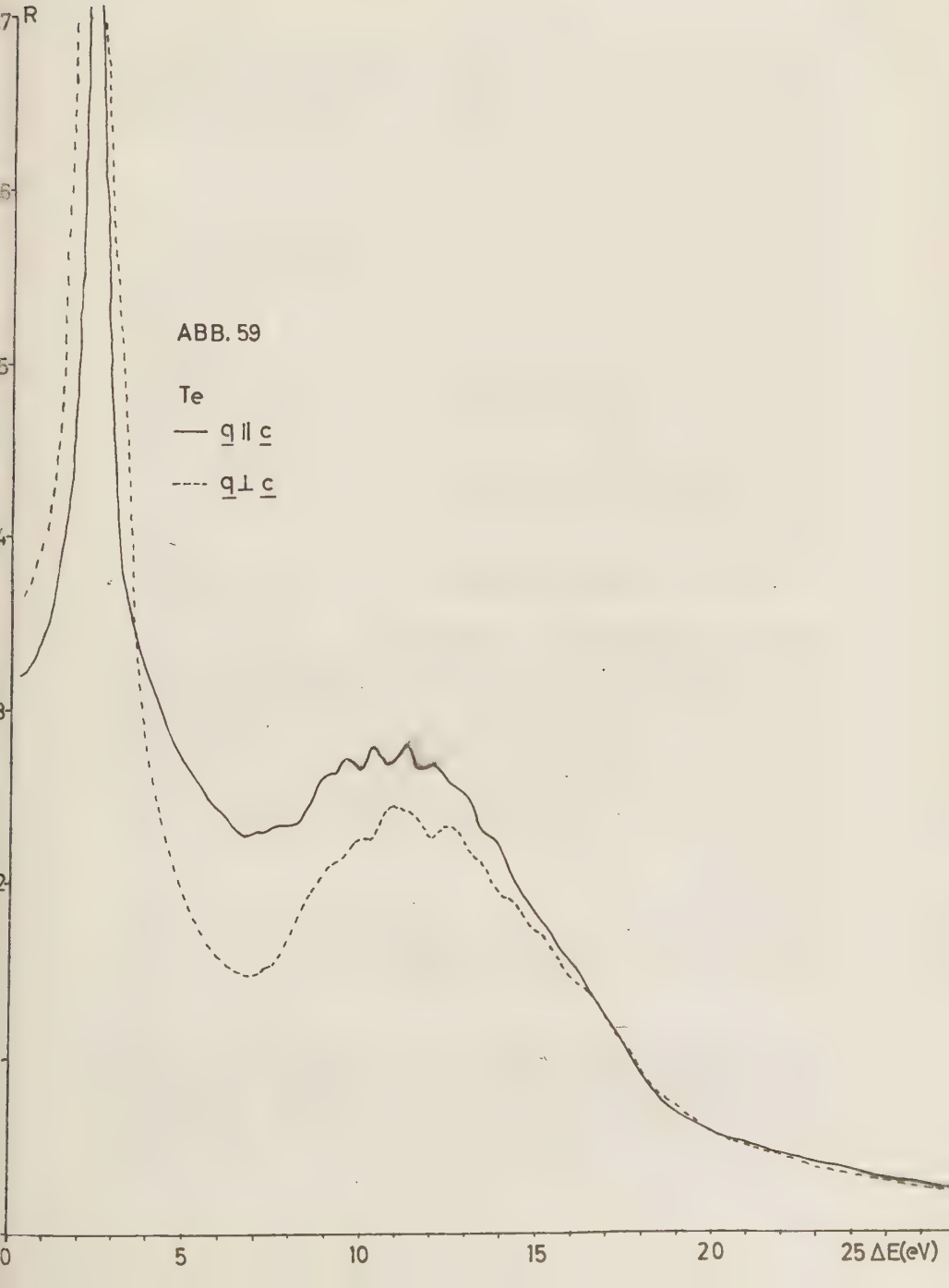
ABB. 57

Te

— $\underline{q} \parallel \underline{c}$

---- $\underline{q} \perp \underline{c}$


ε2
60
50
40
30
20
10
0
6
5
4
3
2
1
0
5
10
15
20
25ΔE(
ABB. 58
Te
q ∥ c
q ⊥ c


R
ABB. 59
Te
q ∥ c
q ⊥ c
0
5
10
15
20
25 ΔE(eV)

zu betrachten. Ab 3,5 eV ist die Größe der Verlustintensität gesichert. Um die optischen Konstanten berechnen zu können, mußte außerdem die absolute Höhe der Verlustfunktion festgelegt werden, die sonst durch die Messung der Schichtdicke bestimmt wird.

Zuerst wurde eine Anpassung unserer Verlustfunktion an den von Koch, Klucker und Tuomi [2] berechneten $|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(17\ \mathrm{eV})| = 1{,}9 - 2{,}0$ versucht. Dies führte zu unsinnigen optischen Konstanten. Zum Beispiel war $\varepsilon_2 \approx 0$ und $\varepsilon_1 \ll -1$ für $\Delta E \to 0$. Es stellte sich heraus, daß dieser Effekt erst bei der Anpassung an wesentlich kleinere Absolutwerte $|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(17\ \mathrm{eV}) \leq 1{,}45$ verschwand. Man hatte also hier ein neues Kriterium, das die Freiheit der Absolutanpassung einschränkte. Nur wenn durch die Wahl der absoluten Größe von $|\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E)|$

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E \approx 0) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\Delta E' \cdot \mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\Delta E')}{\Delta E'^2 - \Delta E^2}\, d\Delta E' + 1 > 0$$

war, gab es vernünftige Ergebnisse wie $\varepsilon_1(\Delta E \approx 0) > 0$. Eine Anpassung der absoluten Höhe der Verlustfunktion an die $\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}$-Werte von Tutihasi [44] im Bereich zwischen 5 eV und 10 eV führte dann zu optischen Konstanten, wie sie in den Abb. 57, 58, und 59 dargestellt sind. Übrigens sind auch die Reflektivitätsmessungen von Klucker, Koch und Tuomi an die Werte von Tutihasi bei Energien um 3 eV angepasst.

6.4. Vergleich mit anderen Ergebnissen

CEV-Messungen an einkristallinem Tellur liegen nicht vor. An polykristallinem Tellur sind uns Messungen von Möllenstedt [10], Leder u. Marton [45], Leder [46], Gauthé [47] und Robins [23] bekannt. Zum Vergleich sei hier ein Spek-

trum von Leder [46] abgebildet, das auch in Transmission mit einem Möllenstedtanalysator gewonnen wurde (Abb.60). Für die Lage des Hauptmaximums werden Werte zwischen 17,0 eV und 20,0 eV angegeben. Für die Lage des Nebenmaximums liegen die angegebenen Werte zwischen 4,6 und 8 eV. Unsere entsprechenden Energien sind 17,6 eV($\perp$ c) bezw. 17,3 eV ($\parallel$ c) und 5,2 eV ($\perp$ c). Die polykristallinen Schichten müßten in erster Näherung zu 2/3 durch das einkristalline Spektrum für $\underline{q} \perp \underline{c}$ bestimmt sein. Deshalb ist das Nebenmaximum relativ deutlich bei den Spektren von polykristallinem Tellur zu erkennen.

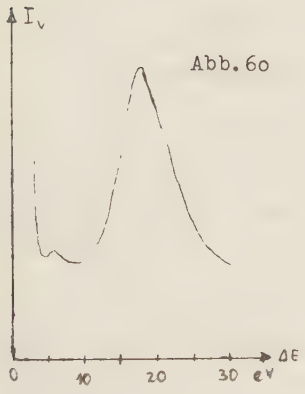


Abb.6o

Von einkristallinem Tellur liegen hauptsächlich optische Reflektivitätsmessungen vor [48, 26, 49, 50, 44, 2]. Wir möchten hier unsere Ergebnisse mit den zwei neuesten optischen Messungen vergleichen. Tutihasi, Roberts, Keezer und Drews [44] bestimmten die Reflektivität an $(10\bar{1}0)$-Flächen mit linear polarisiertem Licht im Energiebereich von 0,35 bis 12 eV (siehe auch 5.5.).

Klucker, Koch und Tuomi [2] maßen auf dieselbe Art die Reflektivität mit Synchrotronstrahlung des DESY im Bereich von 3 eV bis 30 eV und paßten die Ergebnisse an die Absolutwerte von Tutihasi an.

Tutihasi und Klucker et al. (DESY) berechneten aus ihren Reflektivitätskurven die optischen Konstanten. Wir möchten hier in Abb. 61 die ε_2-Spektren davon vergleichen.

ABB.61

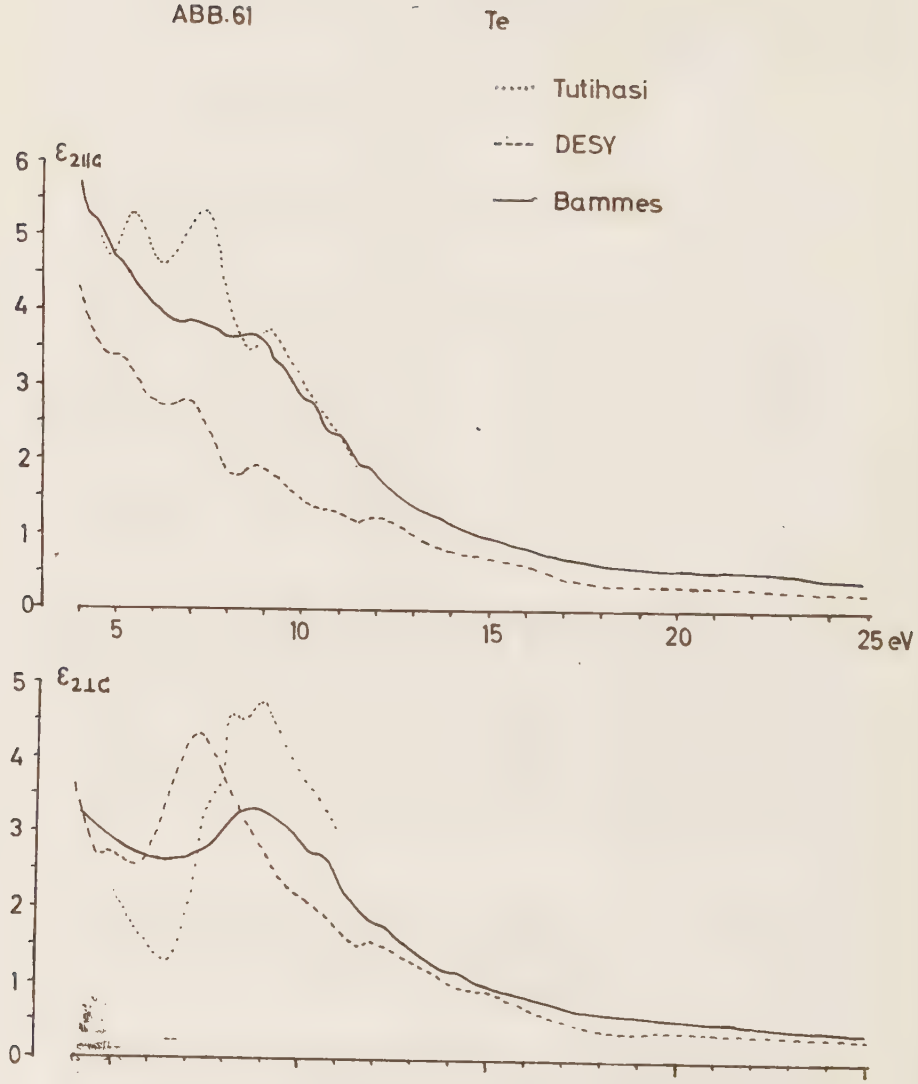


Abb. 61 : Die ε_2-Werte von Tutihasi sind aus einer kleinen Abbildung vergrößert worden und können deshalb in der Höhe um ca. 15 % falsch sein. Die Lage der Strukturen stimmt aber.

Die Kurven beginnen erst bei 4 eV, weil unsere ε_2-Werte für kleinere Energien sehr unzuverlässig sind. Lage, Höhe und Anisotropie des Hauptmaximums bei 2 eV stimmen aber ungefähr überein:

Autor		Tutihasi	DESY	Bammes
Energie	$\parallel c$	2,0 eV	1,8 eV	2,2 eV
	$\perp c$	2,2 eV	1,9 eV	2,0 eV
Höhe	$\parallel c$	57	41	63
	$\perp c$	37	33	51

Für $\underline{E}$ bezw. $\underline{q} \parallel \underline{c}$ zeigen die ε_2-Spektren aller drei Messungen ab 4 eV viele Gemeinsamkeiten (Abb.61). Bis auf eine Diskrepanz bei 9 eV zwischen Tutihasi's und den anderen Messungen ist nur die Betonung einzelner Strukturen in den verschiedenen Messungen unterschiedlich. Die zusätzliche ε_2-Struktur der CEV-Messung bei 10,2 eV könnte wieder durch nichtsenkrechte Übergänge zustande gekommen sein.

Für $\underline{E}$ bezw. $\underline{q} \perp \underline{c}$ liegt in Abb. 61 das Hauptmaximum der DESY-Messung gegen das Maximum der anderen zwei Arbeiten um 1,5 eV verschoben. Sonst aber treten viele Strukturen der ε_2-Spektren von der DESY-Gruppe und von uns gemeinsam auf, wenn auch wieder verschieden betont.

Zusammenfassend kann man sagen, daß unsere Messungen an Tellur die hier diskutierten optischen Messungen in grossen Teilen bestätigt haben und daß sie bei Diskrepanzen zwischen den optischen Messungen zur Klärung dieser beitragen konnten.

6.5. Interpretation

Berechnet man wie schon bei Selen die Plasmaenergie unter der Annahme, daß die sechs Valenzelektronen frei

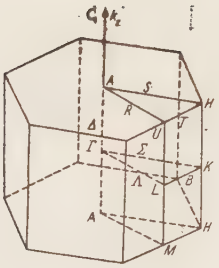
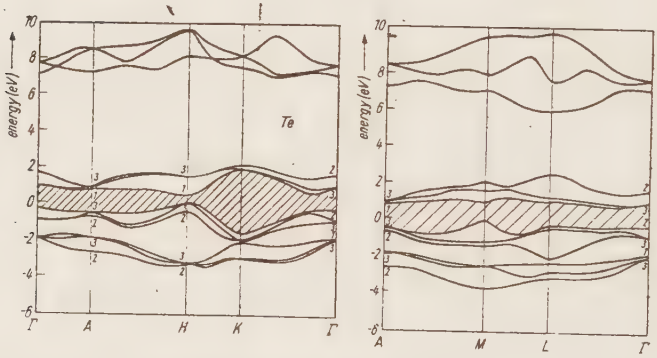


Abb.62

Brillouinzone von Tellur



Energiebänder von Tellur [51]

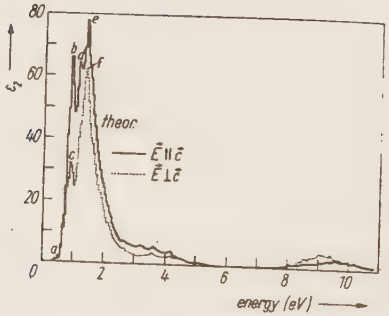


Abb.63: ε_2-Spektrum von Tellur [51]

sind, so erhält man

$$\hbar\omega_p = 15{,}6 \text{ eV}$$

Die Nulldurchgänge des ε_1-Spektrums (Abb.57) liegen bei 15,2 eV ($\perp \underline{c}$) und 15,4 eV ($\parallel \underline{c}$) und würden so, wie bei Selen, das Modell des freien Elektronengases bestätigen. Das Hauptmaximum der Verlustfunktion (Abb.54) liegt aber bei 17,5 eV und wiederspricht dem Modell. Die Verschiebung zwischen $\hbar\omega_p$ und CEV-Maximum ist aber bei Selen und Tellur prozentual praktisch gleich. Das heißt, die Verschiebung des CEV-Maximums von Tellur gegenüber Selen ist allein durch das unterschiedliche Elementarzellenvolumen zu erklären.

Um die ε_2-Struktur mit Elektronenübergängen im Energiebandschema zu identifizieren, benützen wir die Ergebnisse von Maschke [51]. Er berechnete ähnlich wie Sandrock [30] (5.6.) bei Selen mit der Pseudopotentialmethode die Energiebänder (Abb.62) und das ε_2-Spektrum (Abb.63) von Tellur. Von Vergleichen mit anderen Rechnungen [35, 37, 53] sehen wir aus den gleichen Gründen wie bei Selen (5.6.) ab.

Auch bei Tellur lassen sich die ε_2-Strukturen nicht als einzelne Übergänge in der Brillouinzone lokalisieren, weil die Bänder relativ flach sind. Ebenso hat das Matrixelement einen meistens nicht zu lokalisierenden Einfluß.

Um die Güte der Theorie zu prüfen, muß man also wie bei Selen die ε_2-Spektren von Theorie und Experiment vergleichen. Dieser Vergleich wurde von Maschke ausführlich gezogen. Bis 4 eV ist die Übereinstimmung recht gut (Abb. 61, 63). Im Bereich zwischen 4 und 7 eV geht das theoretische ε_2-Spektrum im Widerspruch zu den Experimenten auf Null zurück. Dieses Minimum ist durch den großen Abstand vom unteren zum oberen Leitungsband entstanden.

Man muß diese große Energielücke also mit etwas Vorsicht in die Diskussium einbeziehen. Oberhalb 7 eV werden die experimentellen Ergebnisse durch die Theorie ungefähr wiedergegeben. Der Grad der Übereinstimmung erlaubt wohl, unsere experimentellen ε_2 -Strukturen in das Energiebandschema von Maschke einzuordnen. Wir benützen wieder ein von uns vereinfachtes Schema, weil sich die ε_2-Strukturen sowieso nicht in der Brillouinzone lokalisieren lassen. In dieses Schema ist zusätzlich ein s-Valenzbandtriplet (VBT3) eingezeichnet [53] (Abb.64). Die ε_2-Struktur bis 5 eV wird durch die Übergänge VBT1 → LBT1 und VBT2 → LBT1 bestimmt. Der erneute Anstieg des ε_2-Spektrums ab 7 eV zeigt den Einsatz des Leitungsbandes LBT2. Die Maxima bis 9 eV sind deshalb den Übergängen VBT1 → LBT2 und VBT2 → LBT2 zuzuordnen. Strukturen ab 10 eV können von dem Übergang VBT3 → LBT1 stammen. Sehr undifferenzierte Strukturen um 16 eV könnten mit dem Einsatz des Überganges VBT2 → LBT2 identifiziert werden.

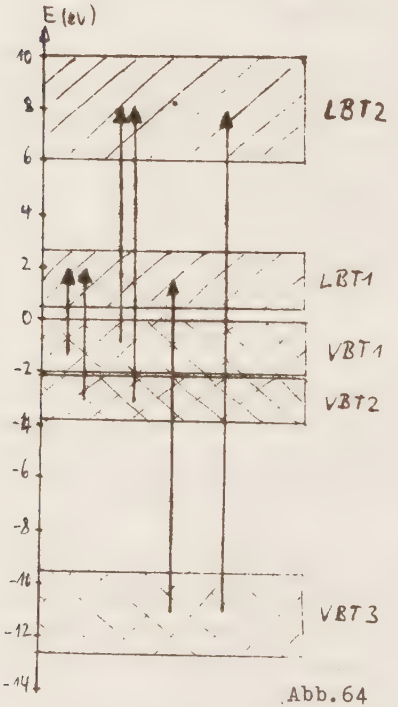


Abb.64

Die deutliche Anisotropie bei 6 eV ist mit den Ergebnissen von Maschke nicht zu verstehen, weil danach nicht nur für $\perp \underline{c}$, sondern auch für $\parallel \underline{c}$ ein ausgeprägtes Minimum des ε_2-Spektrums vorhanden sein sollte.

7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zum ersten Mal CEV-Messungen an einkristallinem Selen und Tellur durchgeführt. Dies wurde durch die Entwicklung einer neuen Schichtpräparationsmethode bei Selen und einer neuen Herstellungsweise von Tellurschichten (mit Otto und Petri [7]) ermöglicht.

Zur Messung der relativ kleinen Anisotropien bei beiden Substanzen waren apparative Neuerungen und Verbesserungen notwendig.

Aus den CEV-Messungen wurden die optischen Konstanten des optisch einachsigen Selen und Tellur für Energien von 3 bis 30 eV berechnet. Dazu war es notwendig, die experimentellen Energie- und Winkelunschärfen in die Rechnung einzubeziehen. Wir berücksichtigten dabei, daß die Unschärfen durch Faltung von Schicht- und verschiedenen Apparatureigenschaften herrühren. Die fehlende Rotationssymmetrie des Möllenstedt-Analysators erforderte zusätzliche Untersuchungen und Rechnungen.

Der Vergleich mit optischen Messungen zeigt, daß es bei der Ermittlung der optischen Konstanten von Selen und Tellur günstig ist, licht- und elektronenspektroskopische Untersuchungen zu machen. Bei mittleren Energien konnten Diskrepanzen verschiedener optischer Messungen durch die völlig andere Methode der CEV-Messung geklärt werden, bei höheren Energien (bis 30 eV) wurden mit der CEV-Messung neue Strukturen gefunden.

Strukturen über 11 eV werden elektronischen Übergängen zugeordnet (zum Teil gemeinsam mit Klucker, Koch und Tuomi [2]), wobei Bandrechnungen von Sandrock [30, 31] und Masch-

ke [51] verwendet werden.

Es werden Spektren bei so großen Streuwinkeln gemessen, daß wegen der Größe des abgegebenen Impulses Änderungen der Verluststruktur auftreten. Bei Selen wird diese Dispersion zum ersten Mal nicht mit der Änderung der kombinierten Zustandsdichte wie bei Graphit [38], sondern mit einer Änderung der Interbandoszillatorstärke (Matrixelement) erklärt.

8. Anhang: Rechenprogramm zur Berechnung der optischen Konstanten.

Beschreibung des Rechenprogramms:

Zeile

23 - 39	Einlesen und Ausdrucken der Daten des Verlustspektrums IM.
40 - 44	Event. Interpolation der Verlustdaten, um bei kleineren Energien kürzere Stützstellenabstände zu erhalten.
45 - 53	Einlesen und Ausdrucken der Winkelverteilungsfunktion WH($\varphi = 0$) und WV($\varphi = 90^{o}$).
54 - 72	Berechnung des Winkelfaltungsintegrals.
73 - 75	Berechnung von Im $\varepsilon^{-1}(\Delta E)$.
76 - 85	Extrapolation von Im $\varepsilon^{-1}(\Delta E)$ zu hohen Energien.
86 - 91	Eventuelle absolute Anpassung von Im ε^{-1}.
92 - 100	Berechnung von n_{eff}.
101 - 134	Berechnung von Re ε^{-1}(RE).
135 - 138	Berechnung von ε_1 (DKA) und ε_2(DKB).
139 - 152	Berechnung von n(NO) und k(KO).
153 - 158	Berechnung von R (Reflektivität).

```
'BEGIN' 'COMMENT' BERECHNUNG DER DK AUS ENERGIEVERLUSTSPEKTRUM
                  MIT DISPERSIONSRELATION
ZU DEN DATEN
N=ZAHL DER ENERGIESCHRITTE                EA=MAXIMAL ZU RECHNENDE ENERGIE
EMAX=MAXIMAL ZU PLOTTENDE ENERGIE         DKAMIN=KLEINSTES ZU PLOT EPS1
DKAMAX=GROESSTES ZU PLOT EPS1             DKBMAX=GROESSTES ZU PLOT EPS2
IMKMAX=GROESSTER ZU PLOT IM(1/EPS)        NTHETA=ZAHL DER THETASCHRITTE
EO=PRIMAERENERGIE DER ELEKTRONEN          THETAO=STREUWINKEL
NPHI=ZAHL DER PHISCHRITTE                 DTHETA=SCHRITTWEITE VON THETA
IO=PRIMAERINTENSITAET                     EHALB=ENERGIEHALBWERTSBRITE DER PRIMAERL
D=DICKE DER SCHICHT IN ANGSTR             M=ZAHL DER EINGELESENEN IM
IM=VERLUSTINTENSITAET AM SCHREIBER        FIT=SIEHE IMFIT
IMFIT=IM(1/EPS) ZUM FITTEN AN DER STELLE E=FIT=H
IMFIT=0  ES SOLL NICHT GEFITTET WERDEN
WH  WV=WINKELEMPFINDLICHKEIT DES ANALYSATORS ALS F(THETA) FUER PHI=0 UND PI/2
DABEI GIBT PHI=0 DIE STREUKICHTUNG AN   ERSTES THETA FUER WH UND WV BEI DTHETA/2
T=UM DIESEN FAKTOR WERDEN DIE EINGEGEBENEN STUETZWERTE ERHOEHT
Z=ZAHL DER BERECHNETEN EPS
,,
'INTEGER'N,I,K,L,NTHETA,NPHI,FIT,M,T,Z,,
'REAL'EA,E,H,PI,EMAX,DKAMIN,DKAMAX,DKBMAX,IMKMAX,D,EHALB,IO,DTHETA,DPHI,EO,THETA
O,IMFIT,ST,IMO,NEFF,A,,
23 READ(N,EA,M,EMAX,DKAMIN,DKAMAX,DKBMAX,IMKMAX,NTHETA,NPHI,DTHETA,EO,THETAO,IO,EHA
LB,D,FIT,IMFIT,A,T,Z),,
PAGE)
PRINT
    (N,EA,M,EMAX,DKAMIN,DKAMAX,DKBMAX,IMKMAX,NTHETA,NPHI,DTHETA,EO,THETAO,IO,EHA
LB,D,FIT,IMFIT,A,T,Z),,
'BEGIN'
'ARRAY' IM(/0..N/),
WH(/1..NTHETA/),WV(/1..NTHETA/),F(/1..N/),,
H,=EA/N,,    PI,=3.14159265359,,    IM(/0/),=0,,
WRITE('('       EINGELES IM
'))'),,
```

```
    'BEGIN'
    READ(IM[I]);
    PRINT(IM[I]);
    'END';
40  'FOR' L,=1'STEP'1'UNTIL'T=1'DO'
    'BEGIN'
    'FOR'I,=T=L'STEP'T'UNTIL'T*M=L'DO'
    IM(/I/),=IM(/I*L=T/)+(IM(/I+L/)=IM(/I+L=T/))/T*(T=L),;
    'END',;
45  WRITE('('           WH              WV
    )'),;
    'FOR'I,=1'STEP'1'UNTIL'NTHETA'DO
    READ(WH[I]),;
    'FOR'I,=1'STEP'1'UNTIL' NTHETA'DO'
    'BEGIN'
    READ(WV[I]),;
    PRINT(WH[I],WV[I]);
    'END';
54  DPHI:=3,1416/2/NPHI;
    'FOR'K,=1'STEP'1'UNTIL'T*M'DO'
    'BEGIN'
    F(/K/),=0,;
    E,=K*H,;
    'FOR'I:=1'STEP'1'UNTIL'NTHETA'DO'
    'BEGIN'
    'FOR'L:=1'STEP'1'UNTIL'NPHI'DO'
    F[K]:=
       2*DTHETA*DPHI*(I*DTHETA=DTHETA/2)
                                    *(WH[I]+2*(WV[I]=WH[I])/3,1416*(L=0,5)*DPHI)
    *(1/(E/(2*E0)*E/(2*E0)+THETA0*THETA0*(I*DTHETA=DTHETA/2)*(I*DTHETA=DTHETA/2)
    =2*THETA0*(I*DTHETA=DTHETA/2)*COS((L=
    0,5)*DPHI))
     +1/(E/(2*E0)*E/(2*E0)+THETA0*THETA0*(I*DTHETA=DTHETA/2)*(I*DTHETA=DTHETA/2)
    =2*THETA0*(I*DTHETA=DTHETA/2)*COS((L=
    0,5)*DPHI+3,1416  )))+F[K];
```

```
    'END' I-SCHLEIFE;
    'END' K-SCHLEIFE;
 73 M.=T*M.;
    'FOR'K1=1'STEP'1'UNTIL'M'DO'
    IM(/K/).=2*PI*PI*0.5*IM(/K/)*EO/(D*EHALB*IO*F(/K/));
 76 'FOR'K1=M+1'STEP'1'UNTIL'N'DO'
    'BEGIN'
    ST1=((IM[M]-IM[M-1])/H*(IM[M]-IM[M-2])/(2*H)*(IM[M]-IM[M-4])/(4*H)) /3;
    IM[K]1=
          =27*IM[M]*IM[M]*IM[M]*IM[M]/
    (ST*ST*ST*
    (K*H-M*H-3*IM[M]/ST)*
    (K*H-M*H-3*IM[M]/ST)*
    (K*H-M*H-3*IM[M]/ST));
    'END';
 86 'IF'IMFIT'NOT EQUAL'0'THEN'
    'BEGIN'
    IMO1=IM[FIT];
    'FOR'K1=1'STEP'1'UNTIL'N'DO'
    IM[K]1=IMFIT/IMO    *IM[K];
    'END';
 92 WRITE('('        ENERGIE          WINKELKOR.          NEFF
    ')'),,
    NEFF.=-A*H*IM(/1/)*H/16.,
    'FOR'K.=T'STEP'T'UNTIL'  M'DO'
    'BEGIN'
    E.=K*H.,
    NEFF.=-A*E*IM(/K/)*H+NEFF.,
    PRINT(E,F(/K/),NEFF).,
    'END'.,
101 WRITE('('        ENERGIE          VERLUSTFUNKTION       EPSILON1              EPSILO
    N2              BRECHUNGSINDEX     ABSORPTIONSINDEX     REFLEKTIVITAET
    ')'),,
```

```
    'FOR'K,=1'STEP'1'UNTIL'Z  'DO'
    'BEGIN' 'COMMENT' BERECHNUNG DES REALTEILS FUER ENERGIE K*H,,
    'INTEGER'J,,
    'REAL'  ES,S,IMK,RE,NE,DKA,DKB,BE,PH,NO,KO,DI,R;
    E,=K*H,,     S,=0,,
    'IF' K 'EQUAL' 1 'THEN' 'GOTO' MA,,
    'IF' K 'EQUAL' 2 'THEN' 'GOTO' MB,,
    'FOR'J,=1'STEP'1'UNTIL'K-2'DO'
    'BEGIN'
    ES,=J*H,,
                  S,=H*ES*IM(/J/)/(ES+E)/(ES-E)+S,,
    'END',,
    MB'
          ES,=E-H,,  S,=H*ES*IM(/K-1/)/(ES+E)/(ES-E)/2+S,,
    MA'
          ES,=E-H,,  S,=-ES*IM(/K-1/)/(ES+E)*S,,
    ES,=E+H,,    S,=ES*IM(/K+1/)/(ES+E)+S,,
    'IF'K'EQUAL'N-1'THEN' 'GOTO' MD,,
    S,=H*ES*IM(/K+1/)/(ES+E)/(ES-E)/2+S,,
    'IF'K'EQUAL'N-2'THEN' 'GOTO'MC,,
    'FOR'J,=K+2'STEP'1'UNTIL'N-1'DO'
    'BEGIN'
    ES,=J*H,,
                  S,=H*ES*IM(/J/)/(ES+E)/(ES-E)+S,,
    'END',,
    MC,,
          ES,=EA,,  S,=H*ES*IM(/N/)/(ES+E)/(ES-E)/2+S,,
    MD,,
          S,=(S/PI)*2,,
    RE,=S,,
    IMK=IM[K]; RE=RE+1;NE=IMK*IMK+RE*RE;
135 'IF'NE'NOT EQUAL'0'THEN'
    'BEGIN' DKA,=RE/NE,,   DKB,=IMK/NE,,  DKB,=-DKB,,
    'END'
```

```
    'ELSE' WRITE('('NE IST NULL')'),,
139 BE:=SQRT(DKA*DKA+DKB*DKB);
    BE:=SQRT(BE);
    'IF'DKA'NOT EQUAL'0'THEN'
    'BEGIN'
    PHI:=ARCTAN(DKB/DKA);
    'IF'DKA'LESS'0'THEN'
    'BEGIN'
    PHI:=PH+PI;
    'END';
    PHI:=PH/2;
    NO:=BE*COS(PH);
    KO:=BE*SIN(PH);
    'END'
    'ELSE'WRITE('('DKA IST NULL')');
153 DI:=(NO+1)*(NO+1)+(KO*KO);
    'IF'DI'NOT EQUAL'0'THEN'
    'BEGIN'
    R:=((NO-1)*(NO-1)+(KO*KO))/DI;
    'END'
    'ELSE'WRITE('('DI IST NULL')');
    PRINT(E,IMK,DKA,DKB,NO,KO,R),,
    'END' ENERGIESCHLEIFE,,
    PAGE;
    'END';
    SCHLUSS,,    'END'  PROGRAMM DISPERSIONSRELATION,,
```

9. Literaturverzeichnis

1 J. Daniels, C.v.Festenberg, H. Raether and K. Zeppenfeld, Springer Tracts Modern Physics 54

2 P. Bammes, R. Klucker, E.E. Koch, and T. Tuomi, phys. stat.sol. 49, 561 (1972)

3 J. Hubbard, Proc.Phys.Soc. (Lond.) A68, 411 and 976 (1955)

4 G. Harbeke, phys.stat.sol. 27, 9 (1968)

5 Siehe Zitate in 7

6 C.H. Griffiths and H. Sang, Appl.Phys.Lettres 11, 118 (1967)

7 P. Bammes, A. Otto und E. Petri, phys.stat.sol., wird veröffentlicht (1972)

8 S. Tolansky, Multiple-Beam-Interferometry; Oxford 1949

9 J.B. Swan, A. Otto and H. Fellenzer, phys.stat.sol. 23, 171 (1967)

10 G. Möllenstedt, Optik 5, 499 (1949)

11 G. Möllenstedt und W. Dietrich, Optik 12, 246 (1955)

12 H. Höhberger, Diss., wird veröffentlicht

13 H. Raether, Springer Tracts Modern Physics 38

14 H. Fröhlich, H. Pelzer, Proc.Phys.Soc. (Lond.) A68, 525 (1955)

15 J. Daniels, Z.Physik 227, 234 (1969)

16 H. Bode, Network Analysis and Feedback Amplifier Design, Princeton (1945)

17 F. Bassani, E. Tosatti, Phys.Letters A27, 446 (1968)

18 E. Tosatti, F. Bassani, Nuovo Cemento B63, 458 (1969)

19 M. Skibowski, Diplomarbeit, Universität München (1964)

20 S. Tutihasi and I. Chen, Phys.Rev. 158, 623 (1967)

21 A.G. Leiga, J.Opt.Soc.Am. 58, 880 (1967)

22 H. Friedmann, Z.Naturf. 11a, 373 (1956)

23 J.L. Robins, Proc.Phys.Soc. 79, 119 (1962)

24 F. Eckart, W. Henrion, and H. Peibst, Z.phys.Chem. 227, 93 (1964)

25 R.C. Keezer, and J.W. Moody, Appl.Phys.Letters 8, 233 (1966)
26 J. Stuke and H. Keller, phys.stat.sol. 7, 189 (1964)
27 W. Henrion, phys.stat.sol. 22, K33 (1967)
28 E. Mohler, J. Stuke, and G. Zimmerer, phys.stat.sol. 22, K49 (1967)
29 W. Henrion and R. Osswald, phys.stat.sol. 33, K147 (1969)
30 R. Sandrock, Phys.Rev. 169, 642 (1968)
31 R. Sandrock, phys.stat.sol. 43, 199 (1971)
32 J.R. Reitz, Phys.Rev. 105, 1233 (1957)
33 D.J. Olechna and R.S. Knox, Phys.Rev. 140, A 986 (1965)
34 R.E. Beissner, Phys.Rev. 145, 479 (1966)
35 J. Treusch and R. Sandrock, phys.stat.sol. 16, 487 (1966)
36 M. Picard and M. Hulin, phys.stat.sol. 23, 563 (1967)
37 B. Kramer and P. Thomas, phys.stat.sol.26, 151 (1968)
38 K. Zeppenfeld, Z.Physik 243, 229 (1971)
39 J.A. Bearden, A.F. Burr, Rev.mod.Phys. 39, 125 (1967)
40 V.M. Agranovich, V.L. Ginzburg: Spatial Dispersion in Crystal Optics and the Theorie of Excitons, Intersc.Monogr.Vol. 28, London 1966
41 E. Tosatti, Nuovo Cimento B63, 54 (1969)
42 S. Kunstreich, Diss. Universität München (1972)
43 E. Tosatti, Diss. Universität Pisa (1970)
44 S. Tutihasi, G.G. Roberts, R.C. Keezer, and R. E. Drews, Phys.Rev. 177, 1143 (1969)
45 L.B. Leder and L. Marton, Phys.Rev. 95, 1345 (1954)
46 L.B. Leder, Phys.Rev. 103, 1721 (1956)
47 B. Gauthé, Phys.Rev. 114, 1256 (1959)
48 V.V.Sobolev, Dokl.Akad.Nauk. SSSR 151, 1308 (1963)
49 H. Merdy, Ann.Phys.(Paris) 1, 289 (1966)
50 F. de Chelle and H. Merdy, Compt.Rend. 265, B 968 (1967)
51 K. Maschke, phys.stat.sol. 47, 511 (1971)
52 M. Hulin and M. Picard, Solid State Commun.7, 1587 (1969)
53 K. Maschke, private Mitteilung

Herrn Prof. Dr. W. Rollwagen möchte ich dafür danken, daß er die Durchführung dieser Arbeit ermöglichte und mir beim Auftreten einiger Schwierigkeiten großzügig half.

Wesentlich beeinflußt wurde der Fortgang der Arbeit durch Anregungen, die sich aus vielen Diskussionen mit Herrn Dr. A. Otto ergaben. Ich bin ihm dafür zu besonderem Dank verpflichtet.

Herrn Prof. Dr. W. Steinmann danke ich für seine Bereitschaft, mit seinem Rat zur Klärung von Fragen beizutragen.

Den Herren der Werkstatt bin ich für die prompte Herstellung von Apparaturteilen dankbar.

Dem Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften danke ich für die Zuteilung von Rechenzeit.

Zuletzt möchte ich feststellen, daß ich mich in der Arbeitsgruppe Otto sehr wohlfühlte, was bestimmt neben den hilfreichen Diskussionen das Gelingen dieser Arbeit beeinflußte. Dabei möchte ich besonders den Herren Höhberger, Koch und Petri für die gute Zusammenarbeit bei gemeinsamen Arbeiten danken.

Lebenslauf

Am 22. Februar 1940 wurde ich als Sohn des Journalisten Friedrich Bammes und seiner Ehefrau Charlotte, geb. Schneider, in Dresden geboren.

Nach einem dreijährigen Aufenthalt in der Türkei wohnten wir in Oberschwaben. In Ostrach besuchte ich von 1946 bis 1950 die Volksschule, in Sigmaringen von 1950 bis 1951 ein humanistisches Gymnasium und in Ravensburg von 1951 bis 1959 das humanistische Spohn-Gymnasium. Im Februar 1959 legte ich dort das Abitur ab. Danach leistete ich bis zum Herbst 1960 einen verlängerten Wehrdienst bei der Bundeswehr ab.

Im Wintersemester 1960/61 begann ich an der Universität München mit dem Studium der Physik. Nach Anfertigung einer Diplomarbeit am Lehrstuhl Prof. Rollwagen der Sektion Physik der Universität München mit dem Thema "Untersuchungen von Bereichsstrukturen auf quaderförmigen ‹100› -Nickeleinkristallen" bestand ich im Wintersemester 1966/67 die Diplom-Hauptprüfung. Danach begann ich am gleichen Lehrstuhl mit der Arbeit an meiner Dissertation.

Im April 1967 heiratete ich Roswitha Neyer, im August 1968 wurde unser Sohn Florian und im August 1971 unsere Tochter Veronika geboren.